

PHD ÉRTEKEZÉS

HIERARCHIKUS ÉS RENDEZETLEN RENDSZEREK KRITIKUS VISELKEDÉSE

Írta: Szalma Ferenc

Témavezető: Dr. Iglói Ferenc
egyetemi tanár

JATE ELMÉLETI FIZIKAI TANSZÉK
SZEGED

1998

Tartalomjegyzék

1	Bevezetés	3
2	Statisztikus fizikai áttekintés	8
2.1	Modellek, mennyiségek, fázisátalakulások	8
2.1.1	Spin modellek	8
2.1.1.1	Ising-modell	9
2.1.1.2	Potts-modell	9
2.1.2	Statisztikus fizikai átlagok	10
2.1.3	Fázisátalakulások	12
2.1.3.1	Renormálási csoport transzformáció	12
2.1.3.2	Skálázás	14
2.1.3.3	Kritikus exponensek	16
2.1.3.4	Perturbációk, relevancia-irrelevancia kritériumok	17
2.1.3.5	Konform invariancia	18
2.2	Számolási technikák	20
2.2.1	Transzfermátrix módszer	20
2.2.1.1	Ising-lánc transzverz térben (szabad fermion leírás)	22
2.2.2	Monte Carlo-módszerek	29
3	Véletlen kötésű Ising-rendszerek vizsgálata	37
3.1	Bevezetés	37
3.2	Előzmények	37
3.3	Kétdimenziós hígított Ising-modell	41
3.3.1	Tömbi fázisátalakulás	42
3.3.2	Felületi fázisátalakulás	45
4	Hierarchikus kölcsönhatású modellek	49
4.1	Bevezetés	49
4.2	Felületi mágnesezettség	50

TARTALOMJEGYZÉK	2
4.3 Határfelületi fluktuáció	57
4.4 Renormálási csoport vizsgálat	61
5 Összefoglalás	68
Függelék	70
Angol nyelvű összefoglaló	71
Köszönetnyilvánítás	77
Irodalomjegyzék	78

1. fejezet

Bevezetés

A két tapasztalatból is legismertebb fázisátalakulás a folyadék-gáz, illetve a ferromágnes-paramágnes fázisátalakulás. A folyadék-gáz és a mágneses fázisátalakulás első elméleti leírása van der Waals [96] és Weiss [100] nevéhez fűződik, akik az átlagtér elmélet keretében vizsgálták a két különböző rendszert, ahol a rendszert alkotó részecskék a többiek által keltett homogén potenciál-, vagy mágneses térben helyezkednek el. Ezen klasszikus elméletek — a '30-as években — a Landau-elméletben [55][56] nyerték el végleges alakjukat, amelyben bevezetésre került a rendparaméter fogalma. Ezen elmélet alapfeltevése szerint a különböző termodinamikai mennyiségek a fázisátalakulási pont környékén sorbafejthetők a rendparaméter szerint. Ezen sorok vizsgálata tette lehetővé a fázisátalakulások pontosabb megértését.

A statisztikus fizikában jellemző sokrészecskés bonyolult rendszerek fázisátalakulásainak elméleti vizsgálatában az első analitikus megoldás a kétdimenziós Ising-modell Onsager-féle megoldása (1944) [70], amely lehetőséget adott a klasszikus elmélettel való összehasonlításra. A két elmélet diszkrepanciája (az eltérő kritikus exponensek) rávilágított a klasszikus elmélet hiányosságaira, a korrelációk nem megfelelő figyelembevételére és a fluktuációk szerepére.

Másodrendű fázisátalakulásokban nagy szerepet játszó korrelációs hossz fontosságát és a fluktuációk szerepét a '60-as években ismerték fel. Ebben az időben születik meg a Widom-féle skálahipotézis [101][102] és a Kadanoff-féle blokkspin transzformáció [46], amelyek mind elemei a fázisátalakulások később kialakuló általános elméletének. A kísérleti eredmények arra utaltak, hogy a kritikus exponensek nagyfokú univerzalitást mutatnak függetlenül az anyagi minőségtől [21][47], függetlenül az anyag mikroszkopikus kölcsönhatásainak erősségétől. Ezek sem adták azonban vissza a klasszikus elmélet exponenseit és több univerzalitási osztály létezésére is utaltak. Továbbá a különböző hőmérsékleti sorfejtések is alátámasztották a kritikus ponthoz közeli skála-

viselkedést.

Az áttörést a térelméletekben már korábban is ismert renormálás alkalmazása jelentette (Wilson 1971) [103], amely a rendszert a renormálási csoport transzformáció során egy kevesebb szabadsági fokkal, de azonos tulajdonságokkal (pl. azonos szimmetriájú Hamilton-operátorral) rendelkező rendszerre képezi le, amelynek ötlete abból származik, hogyha a rendszerben levő karakterisztikus hosszúság — amelyet a korrelációs hossz jellemez — végtelenné válik, akkor a rendszer önhasznós [16], azaz bármekkora részre bontva azt, és a részekben a szabadsági fokokra átlagolva, az ezen transzformáció során kapott új rendszer ugyanolyan jelleget ölt a kritikus pontban, mint az eredeti. Az azonos dimenziójú és azonos Hamilton-operátorra vezető rendszerekre az eljárás azonos kritikus exponenseket ad, így az elmélet magyarázatot adott arra, hogy miért lehetnek meglehetősen különböző fizikai rendszerek kritikus tulajdonságai azonosak. Magyarázatot adott továbbá a skálahipotézisre, illetve a kritikus exponensek közötti összefüggésekre.

Az átlagtér elmélettel csak homogén kölcsönhatású rendszerek voltak vizsgálhatók, amelyet a Landau-elmélet általánosítása tett alkalmassá felületek fázisátalakulásainak vizsgálatára.

A kísérleti technika gyorsütemű fejlődése tette lehetővé a nem homogén (felületekkel, hibavonalakkal, -helyekkel, aperiodikus kölcsönhatás-modulációval rendelkező) rendszerek vizsgálatát. A kvázikristályok [79] kísérleti felfedezése és a jó minőségű atomi rétegeket tartalmazó anyagok (multirétegek) [67] előállítását lehetővé tevő, molekulasugár epitaxia kifejlődése óta erőteljes elméleti érdeklődés indult meg az aperiodikus struktúrák [58] — az olyan „geometriai” jellemzők, mint az önhasznóság vagy kváziperiodikusság hatása [25] a rendszer fizikai jellemzőire — tanulmányozása iránt. A '90-es évek első feléig alapos vizsgálat tárgya volt az ilyen rendszerek fonon, illetve elektronspektruma [44][28].

A '90-es évek elején kezdődött az aperiodikus rendszerek (pl. spinrendszerek) kooperatív viselkedésének — főként kritikus tulajdonságainak — vizsgálata. Jellemzően alacsonydimenziójú modell rendszereket vizsgálnak e területen, mint pl. a kétdimenziós rétegesen aperiodikus klasszikus Ising-modell, vagy az ennek megfelelő egydimenziós aperiodikus kvantum Ising-modell [62][33]. Ezen aperiodikus rendszerekben létrejövő fázisátalakulások megváltozásának kérdése már a homogén kétdimenziós Ising-modell analitikus megoldása után felvetődött.

A korai periodikus [17] és véletlen réteges [66] kétdimenziós modellek (McCoy-Wu-modell) után a kváziperiodikus [58][19] és hígított [90][61][11][38][40] modellek elméleti [37] és — a számítógép kapacitások növekedése folytán egyre pontosabb —

numerikus [89][13][34] és kísérleti vizsgálatok sokasága jelent és jelenik meg napjainkban is a szakirodalomban.

Heurisztikus perturbatív kritériumot sikerült felállítani a hígított mágnesek (mint amilyen például a véletlen kötésű Ising-modell) fázisátalakulása perturbáció hatására történő megváltozására [22]. A perturbáció relevanciája a homogén rendszer fajhő exponenciális növekedésével hozható kapcsolatba. Hasonló — a homogén rendszer kritikus exponenciális növekedésével, illetve a perturbációt jellemző ún. vándorlási exponenciális növekedéssel megadható — kritériumot találtak a gyengén perturbált aperiodikus rendszerekre is [62][63], amelyeket mindezekig minden egzakt és numerikus vizsgálat alátámasztott. Ezek azonban legfeljebb kvalitatív képet adnak az inhomogenitás hatásáról.

Az alkalmazott vizsgálati módszerek egyik leghatékonyabbika a már említett renormálási csoport transzformáció, amely általános elméleti jelentősége mellett, számítási módszert is ad. Jónéhány nem triviális probléma megoldása vált segítségével lehetővé, mint pl. a kétdimenziós háromszögrácson értelmezett Ising-modellé [26], vagy különböző diffúziós folyamatoké bizonyos fraktál struktúrákon [20]. A módszer természetes módon ad lehetőséget az önazonos struktúrák vizsgálatára, mint amilyenek a dolgozatban is vizsgált hierarchikus rendszerek.

Hasonlóan jól alkalmazható módszernek bizonyult a — Kramers és Wannier [53][99] által először alkalmazott — transzfermátrix technika, amely a kétdimenziós Ising-modell Onsager-féle megoldásában is nagy szerepet játszott. Segítségével egyszerűen: a mátrix legnagyobb sajátértékeinek meghatározásával megkaphatjuk a vizsgált rendszer szabadenergiáját, illetve korrelációs hosszát. A homogén rendszereken kívül egyaránt alkalmas hígított [1][78][88] és aperiodikus rendszerek vizsgálatára tetszőleges kötéskiosztások és csatolási erősségek mellett.

Széles körben elterjedt a ma már nemcsak integrálok kiszámítására alkalmazott Monte Carlo-szimuláció, amellyel — a számítógép kapacitások rohamos növekedésének köszönhetően — mezoszkopikus méretű statisztikus rendszerek tulajdonságai is vizsgálhatók. A '80-as évek végén diszkrét spinrendszerekre kidolgozott klaszterflip Monte Carlo-módszerek (amelyek nemcsak egy vagy néhány spint fordítanak át egy lépésben, hanem egész tartományok spinje változik meg), mint a Swendsen-Wang [91] és a még ennél is gyorsabb Wolff-féle [104] módszerek — amelyek a dinamikai exponens zérushoz közeli értéke miatt alig mutatnak kritikus lelassulást a kritikus hőmérséklet közelében — olyan problémákra is alkalmazható, mint a hígított kétdimenziós Ising-modell fázisátalakulásának vizsgálata, amelyben a térelméleti jóslatokból ismeretlen csak bizonyos rendszerméreteknél felett mutathat a minta a már a hígított modellre jellemző, a tiszta rendszerétől esetleg eltérő kritikus exponenseket. A módszer előnye,

hogy a rendszer tetszőleges része, vizsgálható: a felület és a tömbi részek is, ellentétben más, egyébként szintén hatékony módszerekkel, mint pl. a csillag-háromszög transzformáció [27], amellyel csak a rendszer felületéről kaphatunk információt.

Ez a dolgozat a fenti módszerek alkalmazásával vizsgálja önazonos (hierarchikus) és hígított spinrendszerek fázisátalakulásait, illetve az önazonos potenciálban elhelyezkedő irányított polimerlánc viselkedését.

A dolgozat 2. fejezete áttekintést ad a későbbiekben vizsgált vagy felhasznált klasszikus és kvantum spinmodellekről és példát ad lehetséges fizikai realizációjukra. A renormálási csoport transzformáció általános keretei között bevezetem a másodrendű fázisátalakulások esetén később felhasznált fogalmakat és a kritikus exponensek definícióit. Röviden bemutatom a felhasznált módszereket: a transzfermátrix technikát, amelynek keretein belül részletezem a kétdimenziós klasszikus Ising-modell és az egydimenziós transzverzterbeli kvantum Ising-modell kapcsolatát. Tárgyalom továbbá a spinrendszerekre alkalmazott alapvető Monte Carlo-algoritmusok lényeges elemeit. A disszertáció további fejezetei a saját eredményeket tartalmazzák.

A 3. fejezet a kétdimenziós hígított Ising-modell felületi fázisátalakulásaira kapott eredményeket tartalmazza. Nagypontosságú, klaszterflip Monte Carlo-algoritmusok segítségével — a más módszerekkel való összehasonlíthatóság kedvéért — az (11) felületre végzett vizsgálatokkal a hőmérséklet függvényében a kritikus pont közelében (és attól viszonylag távolabb is) effektív mágnesezettségi exponenseket kaptunk, amelyekből a számolás pontosságán belül extrapolálni lehet az aszimptotikus kritikus exponensre. Megvizsgáltuk a tömbi kritikus viselkedésben már korábban tapasztalt — és többek által vitatott — ún. „túllövést” különböző hígítások mellett, illetve vizsgáltuk a mágnesezettségi és exponens profilokat is.

A 4. fejezet három részre tagolódik három különböző vizsgálat szerint. Az elsőben a hierarchikus sorozatnak megfelelő csatoláskiosztású egydimenziós transzverz Ising-modell felületi kritikus viselkedését vizsgálom. A felületi mágnesezettségi exponens a sorozat önazonos struktúrájának köszönhetően analitikusan egzaktul meghatározható. A sorozat kétféle általánosítása esetén is megvizsgáltuk az exponenseket, illetve a fázisátalakulások jellegét.

A második vizsgálat a rétegesen hierarchikus kétdimenziós Ising-modell kétféle spinállapotú fázisát elválasztó határfelület fluktuációjára — amely megfelel az önazonos potenciálban bolyongó részecskének, vagy a potenciálba behelyezett irányított polimernek — vonatkozik. A fluktuáció természetes módon vizsgálható a transzfermátrix módszer segítségével, amelynek legnagyobb sajátértékei véges méret skálázásából következtethetünk a határfelület vándorlási exponensére.

A harmadik vizsgálat egységes keretek között tárgyalja a Ising-modell fázisátalakulását, illetve a határfelület fluktuációját hierarchikus kötés kiosztású rács esetén. Az egységes tárgyalást az teszi lehetővé, hogy a határfelület bolyongásának transzfermátrixa megegyezik a kvantum Ising-lánc energiasajátérték-problémájára kapott mátrixszal. A két feladat a mátrixok elemeinek és sajátértékeinek renormálásával oldható meg a korábban az aperiodikus sorozatokra kidolgozott renormálási csoport módszer segítségével. A megoldások két különböző fixponthoz tartoznak a renormálási csoport transzformációban. Így analitikusan vizsgálhattuk az Ising-modell anizotrópia exponensét [29][6]: a korrelációs hossz más-más exponensekkel skálázódik a rétegekre merőleges irányban és azokkal párhuzamosan. A bolyongó esetében pedig vizsgálhattuk a már előzőleg a transzfermátrix módszer segítségével is kiszámolt vándorlási exponens anomális viselkedését.

A dolgozat utolsó fejezete összefoglalja a legfontosabb eredményeket.

2. fejezet

Statisztikus fizikai áttekintés

2.1 Modellek, mennyiségek, fázisátalakulások

2.1.1 Spin modellek

A lokalizált spinekkel rendelkező mágneses rendszerek egyik legáltalánosabb modellje a

$$\mathcal{H} = -J_{\perp} \sum_{\langle ij \rangle} (s_i^x s_j^x + s_i^y s_j^y) - J_z \sum_{\langle ij \rangle} s_i^z s_j^z - H \sum_i s_i^z$$

Hamilton-operátorral írható le, amelyben az i és j rácspontokon elhelyezkedő spinek megfelelő komponensei a $J_{\perp}$ és J_z csatolási konstansokon keresztül hatnak kölcsön egymással, illetve z komponensük a megfelelő irányú H külső mágneses térrel. A kölcsönhatások rövid távolságúak, az összegzések az $\langle ij \rangle$ legközelebbi szomszédokra történnek.

Az s_i^{α} ($\alpha = x, y$ vagy z a Descartes koordinátákat jelöli) spinoperátorok feles spinű rácspont-objektumok esetén a σ^{α} Pauli-mátrixokkal egyeznek meg. Ezek az operátorok nem felcserélhetők, így a modell alapvetően kvantummechanikai.

A csatolási állandók különböző választása esetén speciális modelleket kapunk. A $J_{\perp} = J_z$ választás a Heisenberg modellt [23] adja vissza, amely bizonyos mágneses szigetelők, mint pl. az *EuS* ferromágneses viselkedését írja le. A Heisenberg modell spin-térben megkövetelt teljes anizotrópiáját kevés anyag mutatja azonban.

A $J_z = 0$ esetén a spinek kétdimenziós kvantummechanikai vektorok, beállításuk az x - y síkra korlátozódik. Ez az ún. X - Y modell, amely annyiban hasonlít a Heisenberg modellre, hogy szokásos értelemben vett fázisátalakulása nem-zérus hőmérsékleten

csak $d > 2$ dimenzióban van.

2.1.1.1 Ising-modell

A $J_{\perp} = 0$ választással az Ising-modellt [43] kapjuk

$$\mathcal{H} = -J_z \sum_{\langle ij \rangle} s_i^z s_j^z - H \sum_i s_i^z, \quad (2.1)$$

amely erősen anizotróp mágneses rendszerek leírására használható, a spin csak a z tengely irányával párhuzamosan állhat be. Ennek megfelelő fizikai rendszer például a MnF_2 , amelynek jó közelítéssel csak egy tengellyel párhuzamosan állhatnak be a spinjei. Feles spin esetén a rácspontok spinjei a σ^z Pauli-mátrix sajátértékeit vehetik fel. Ezzel egy "klasszikus" spin modellt kapunk, hiszen a Hamilton-operátor egymással felcserélhető tagokat tartalmaz, így az operátorok egyszerűen helyettesíthetők sajátértékeikkel. Ez a modell egyszerűsége ellenére nemcsak mágneses rendszerek leírására alkalmas, hanem az ugyanezen Hamilton-operátorra leképezhető rendszerekére is, mint amilyenek például a bináris ötvözetek, amelyekben a sajátértékeknek az felel meg, hogy a két különböző fajta atom közül melyik foglalja el az adott rácspontot. Lényegében azonos Hamilton-operátorra jutunk a rácsgáz modell esetében is, ahol a két sajátérték az adott rácshely betöltöttségét vagy benemtöltöttségét jellemzi, a H pedig egyfajta kémiai potenciál.

Ezekbe a rendszerekbe a rendezetlenséget a J_z csatolási konstansokon keresztül vihetjük be, amelyek rácspont-rácspontra változhatnak.

2.1.1.2 Potts-modell

Az Ising-rendszer Hamilton-operátora írható kicsit másképpen is: az $s_i s_j$ kölcsönhatási tag helyére írva a $2\delta_{s_i, s_j} - 1$ -et lényegében ugyanazt kapjuk (az energiaskálát eltolva) [76]:

$$\mathcal{H} = -2J \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{s_i, s_j} - H \sum_i s_i.$$

Ez a forma lehetőséget ad az általánosításra, amelynek során az ún. q -állapotú Potts-modellt kapjuk, amelyben s_i -k q különböző értéket vehetnek fel: $s_i = 1, 2, \dots, q$. A $q = 2$ érték nyilvánvalóan az Ising-modellnek felel meg.

A kétdimenziós $q = 3$ állapotú Potts-modell szimmetriájával rendelkező rendszer egyik fizikai realizációja a grafit rács felületén adszorbeált kripton. A kripton atomok

elég nagyok ahhoz, hogy ha egy hatszög gyűrűbe bekerülnek, akkor a közvetlen szomszéd gyűrűbe ne kerülhessenek újabbak, így a felületen három alrác keletkezik, amelyeket egy-egy rácsponton a Potts-állapotok indexelnek.

A Potts-modell továbbá fontos szerepet játszott a Monte Carlo klaszterflip algoritmusok kidolgozásánál, mint ahogy azt a későbbiekben látni fogjuk.

2.1.2 Statisztikus fizikai átlagok

Az N elemű rács kanonikus állapotösszege

$$\mathcal{Z}_N(T, H) = \sum_r e^{-\beta E_r}, \quad (2.2)$$

ahol $\beta = 1/kT$, k a Boltzmann-állandó, T a hőmérséklet, H a külső tér. Az összegzés az összes r mikroállapotra (pl. $\{s_i\}$ spinkonfigurációra) történik, E_r az ezekhez tartozó energia.

Általában egy X fizikai mennyiség átlagértékét a következőképpen fejezhetjük ki

$$\langle X \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_r X_r \exp[-\beta E_r] \quad (2.3)$$

A rendszer szabadenergia-sűrűsége az állapot összeg logaritmusával arányos

$$f(T, H) = -kT \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \mathcal{Z}_N(T, H) \quad (2.4)$$

termodinamikai limeszben ($N \rightarrow \infty$). Minden makroszkopikus termodinamikai tulajdonságot a szabadenergia differenciálásával nyerhetünk.

A mágnesezettség az egy spinre eső mágneses momentum átlaga

$$\begin{aligned} m(T, H) &= \frac{1}{N} \langle \mathcal{M} \rangle \\ &= \frac{1}{N} \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \sum_{\{s_i\}} (\mathcal{M}) \exp[-\beta E_{\{s_i\}}], \end{aligned}$$

ahol $\mathcal{M} = \sum_i s_i$, és amelyet beírva pl. (2.1)-et (2.2)-ben E_r helyébe, majd H szerint differenciálva, és figyelembe véve (2.4) -et — termodinamikai határesetben — ugyanazt adja, mint a jól ismert

$$m(T, H) = -\frac{\partial}{\partial H} f(T, H).$$

A szuszceptibilitás, a rendszer külső térre való érzékenysége

$$\begin{aligned}\chi &= \lim_{H \rightarrow 0} \frac{\partial m}{\partial H} \\ &= \frac{1}{NkT} \{ \langle \mathcal{M}^2 \rangle - \langle \mathcal{M} \rangle^2 \} .\end{aligned}$$

A fajhő

$$C = T \frac{\partial^2 f}{\partial T^2} .$$

Korrelációk. A korrelációs függvény a spinek hasonló beállításának valószínűségét méri:

$$G_{ij} = \langle (s_i - \langle s_i \rangle)(s_j - \langle s_j \rangle) \rangle . \quad (2.5)$$

Spinrendszerekben jellemző a korrelációs függvény

$$G(r) \approx \frac{e^{-r/\xi}}{r^{d-2+\eta}} \quad (2.6) \quad r = |i-j|$$

alakú lefutása a rácsállandónál lényegesen nagyobb távolságokban. Az exponenciálisban szereplő ξ azonosítható a korrelációs hosszal. A fázisátalakulási hőmérséklethez közeledve a korrelációs hossz divergál, amely azt eredményezi, hogy egyre nagyobb tartományok spinjei korrelálnak, mígnem végtelenné válik a korreláció hatótávolsága.

A korrelációs hossz divergenciája magában rejti bizonyos fizikai paraméterek divergenciáját is. A minta térfogatára integrálva (2.6)-t vagy összegezve i, j -re (2.5)-ben éppen $\mathcal{M}$ szórását kapjuk, amely χ -ben is megjelenik, így

$$kT\chi \sim \int G(r) d^d r$$

összefüggés alapján világos, hogy miért divergál a szuszceptibilitás a kritikus hőmérsékleten.

Felületi mennyiségek. Ha a vizsgált rendszer felülettel rendelkezik, akkor a szabade-
nergiaiban egy ehhez kapcsolódó új $f_s(T, H, H_s)$ tag is megjelenik, amely a H_s lokális
mágneses tértől is függ.

A előzőekhez hasonlóan származtathatjuk a különböző felületi termodinamikai



menyiségeket, mint pl. a felületi mágnesezettséget, szuszeptibilitást vagy fajhőt [8]:

$$m_s = -\frac{\partial f_s}{\partial H}, \quad \chi_s = \frac{\partial m_s}{\partial H}, \quad C_s = T \frac{\partial^2 f_s}{\partial T^2}.$$

2.1.3 Fázisátalakulások

2.1.3.1 Renormálási csoport transzformáció

A fázisátalakulások elméletében fellépő olyan kérdéseket, mint hogy miért léteznek másodrendű fázisátalakulások esetén univerzalitási osztályok, ezekhez tartozó felső kritikus dimenziók, illetve hogy a termodinamikából ismert exponens egyenlőtlenségek miért egyenlőségekként állnak fenn, vagy hogy a kritikus exponensek ugyanazt az értéket veszik fel ha fölülről vagy alulról közelítünk a kritikus hőmérséklethez, a renormálási csoport transzformáció magyarázza meg, sok esetben egzakt értékeket adva a kritikus hőmérsékletre és kritikus exponensekre. *példa?*

A renormálási csoport transzformáció a rendszer hosszúság skálájának változtatásával működik

$$x' = \frac{x}{b} \quad (b > 1)$$

miközben csökkenti a rendszer szabadsági fokainak számát

$$N' = \frac{N}{b^d},$$

d a rendszer dimenziója. A rendszer tulajdonságai csak a kritikus pontban — a transzformáció fixpontjában — maradnak változatlanok a hosszúság skála változtatásával szemben. A termodinamikai függvények skálázási formába lesznek írhatók.

A transzformáció formálisan a kiindulási és a renormált redukált Hamilton-operátor ($\overline{\mathcal{H}} = \mathcal{H}/kT$) közötti összefüggésként írható:

$$\overline{\mathcal{H}}' = \mathbf{R} \overline{\mathcal{H}}$$

A Hamilton-operátor általános alakja:

$$\overline{\mathcal{H}} = \sum_{\alpha} \vec{\mu} \cdot \vec{S}_{\alpha}$$

ahol $\vec{S}$ komponensei a megfelelő szimmetriájú operátorok szorzatai, és $\vec{\mu}$ komponensei

a hozzájuk tartozó konjugált terek, a paraméter tér komponensei. Az egymás után következő renormálási csoport transzformációk úgy változtatják a Hamilton-operátort, hogy a rendszer végig megy a paramétertéren

$$\vec{\mu}' = \mathbf{R}\vec{\mu}.$$

A leképezés fixpontjában

$$\vec{\mu}' = \vec{\mu} \equiv \vec{\mu}^*$$

és az e pont körüli kis környezetben

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}^* + \delta\vec{\mu} \quad (2.7)$$

$$\vec{\mu}' = \vec{\mu}^* + \delta\vec{\mu}' \quad (2.8)$$

a fixponttól való kis eltérések az eredeti és a renormált rendszerben összekapcsolhatók a renormálási csoport transzformáció Taylor sorfejtésével

$$\delta\vec{\mu}' = \mathbf{L}_b(\vec{\mu}^*)\delta\vec{\mu},$$

ahol $\mathbf{L}_b$ konstans mátrix a transzformáció derivált mátrixa a $\vec{\mu}^*$ fixponban. $\mathbf{L}_b$ mátrix sajátértékei a transzformáció csoporttulajdonságai miatt

$$\lambda_i(b) = b^{y_i}$$

alakba írhatók, ahol y_i skáladimenziók már nem függenek a b skálafaktortól és a rendszer kritikus exponensei kifejezhetők segítségükkel. A $\vec{\mu}^*$ fixpont körüli paramétertérbeli mozgás az $\mathbf{L}_b$ mátrix $\vec{v}_i$ sajátvektoraival egy kezdeti pontból:

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}^* + \sum_i g_i \vec{v}_i,$$

ahol g_i -k a lineáris skálaterek, egy transzformáció hatására

$$\vec{\mu}' = \vec{\mu}^* + \sum_i b^{y_i} g_i \vec{v}_i,$$

pontba jut. Leolvasható, hogy az i -edik skálatér b^{y_i} -vel skálázódik.

$y_i > 0$ esetben a g_i skálatér releváns változó, a renormálás hatására a rendszer távo-

lodik a fixpontjától, legalábbis a lineáritási tartományon belül.

Ha $y_i < 0$ akkor a skálatér irreleváns, az egymásra következő renormálási csoport transzformációk következtében a rendszer a kritikus pontjához közelít.

$y_i = 0$ esetben a (2.7–2.8) egyenletek Taylor sorfejtésekor nem elég az első (lineáris) tagot figyelembe venni csak. A skálatér marginális változó.

A kritikus felületet azon pontok adják a paramétertérben, amelyekben minden releváns skálatér zérus. A felület bármely pontjából indulva a fixpontba jutunk a renormálási csoport transzformáció sokszori végrehajtásával, miközben a korrelációs hossz minden lépésben b -ed részére csökken, amely alapján világos, hogy a rendszer korrelációs hossza a felületen végtelen, mivel a kritikus pontban is az és a rendszer kritikus állapotban van. Ezek szerint az irreleváns paraméterek megváltoztatásával nem vihető ki a rendszer a kritikus állapotából.

A fentiekből látható, hogy különböző fizikai rendszerek azonos univerzalitási osztályba tartoznak ha dimenziójuk megegyezik és hasonló alakú Hamilton-operátor határozza meg¹ viselkedésüket, függetlenül a rendszerekbeli kölcsönhatások részleteitől, amelyek csak a kritikus pont (fixpont) helyét változtathatják meg.

A transzformáció konkrét alakja általában erősen függ az adott problémától.

2.1.3.2 Skálázás

A Hamilton-operátoron keresztül a benne levő paraméterek meghatározzák a redukált szabadenergia-sűrűség $\bar{f} = f/kT$ szinguláris részének viselkedését a renormálás hatására:

$$\bar{f}_{sing}(\vec{\mu}) = b^{-d} \bar{f}_{sing}(\vec{\mu}')$$

a kritikus pont közelében a lineáris skálaterekkel:

$$\bar{f}_{sing}(t, h, g_3, g_4, \dots) \simeq b^{-d} \bar{f}_{sing}(b^{y_t} t, b^{y_h} h, b^{y_3} g_3, b^{y_4} g_4, \dots),$$

ahol $g_1 = t \left(= \frac{T-T_c}{T_c} \right)$ a redukált hőmérséklet, $g_2 = h = H/kT$ a külső mágneses tér, a redukált szabadenergia szinguláris része általánosított homogén függvényként írható. A többi termodinamikai függvény és változó is, mint például a fajhő, a mágnesezettség vagy a szuszceptibilitás, illetve a korrelációs hossz és a korrelációs függvény —

¹Irreleváns paraméterekben különbözhetnek, mint pl. a távolabbi szomszéd kölcsönhatások.

ebből származtathatóan — hasonló skálázási formába (általánosított homogén függvényként) írható a megfelelő g_i skálaterekkel és y_i skáladimenziókkal.

A fajhő a szabadenergia hőmérséklet szerinti második deriváltja a kritikus felület közelében

$$C(t, h = 0) \sim \left. \frac{\partial^2 \bar{f}_{sing}}{\partial t^2} \right|_{h=0} \equiv \bar{f}_{tt}(t, h = 0) \sim b^{-d+2y_t} \bar{f}_{tt}(b^{y_t} t, 0)$$

Mivel b tetszőlegesen választható, legyen $b = t^{-1/y_t}$, és így a fajhő redukált hőmérséklettől való függése

$$C(t, 0) \sim t^{(d-2y_t)/y_t} \bar{f}_{tt}(1, 0) \quad (2.9)$$

alakba írható. A mágnesezettség hasonlóan:

$$m(t, h) \sim -\frac{\partial \bar{f}_{sing}}{\partial h} \equiv -\bar{f}_h(t, h) \sim b^{-d+y_h} \bar{f}_h(b^{y_t} t, b^{y_h} h)$$

és így hasonló skálafaktor választással mint az előbb

$$m(t, 0) \sim t^{(d-y_h)/y_t} \bar{f}_s(1, 0).$$

A szuszceptibilitás pedig

$$\chi(t, 0) \sim t^{(d-2y_h)/y_t} \bar{f}_{hh}(1, 0)$$

A korrelációs függvény — definíciójából következően — arányos a mágnesezettség négyzetével, ezért

$$G(t, h, r) \sim b^{-2x_m} G(b^{y_t} t, b^{y_h} h, \frac{r}{b})$$

alakba írható, ahol $x_m = d - y_h$. A $b = r$ és $h = 0$ választással a korrelációs függvény

$$G(t, 0, r) \sim r^{2(y_h-d)} G(r^{y_t} t, 0, 1) = r^{2(y_h-d)} G\left(\left(\frac{r}{t^{-1/y_t}}\right)^{y_t}, 0, 1\right) = \frac{\mathcal{G}\left(\frac{r}{\xi}\right)}{r^{2(d-y_h)}}$$

alakú, ahol a korrelációs hosszt a

$$\xi \sim t^{-1/y_t}$$

definícióval azonosítjuk.

2.1.3.3 Kritikus exponensek

A kritikus exponensek az előző alfejezetbeli y_i skáladimenziók segítségével a 2.1 táblázat alapján határozhatók meg. Így a fajhő α exponense a (3.5) egyelet segítségével

exponens	definíció
α fajhő exponens	$C_H \sim t ^{-\alpha}$
β mágnesezettség exponens ($h = 0$)	$m \sim (-t)^\beta$
γ szuszeptibilitás exponens ($h = 0$)	$\chi \sim t ^{-\gamma}$
ν korrelációs hossz exponens	$\xi \sim t ^{-\nu}$
η párkorrelációs függvény T_c -nél ($h = 0$)	$G(\vec{r}) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}}$

2.1 táblázat: Az alapvető kritikus exponensek definíciói

$$\alpha = (2y_t - d)/y_t \tag{2.10}$$

és hasonlóan a többi exponensekre

$$\beta = (d - y_h)/y_t \tag{2.11}$$

$$\gamma = (2y_h - d)/y_t \tag{2.12}$$

$$\nu = 1/y_t \tag{2.13}$$

$$\eta = d + 2 - 2y_h \tag{2.14}$$

Az alapvető exponensek láthatóan csak két skáladimenziótól függenek, így közöttük összefüggések találhatók. Például a (3.5) és (2.13) egyenleteket kombinálva kapjuk a hiperskálátörvényt:

$$d\nu = 2 - \alpha, \tag{2.15}$$

vagy (2.10-2.12) egyenletek kombinálásával a Rushbrook skálatörvényt:

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2.$$

Felületi exponensek. A felületi redukált szabadenergia-sűrűsége a skálahipotézis

$$\bar{f}_s(t, h, h_s) = b^{-(d-1)} \bar{f}_s(b^{y_t} t, b^{y_h} h, b^{y_{h_s}} h_s)$$

alakban írható. Ennek segítségével a felületi mágnesezettség β_s kritikus exponense az előzőek szellemében:

$$m_s = -\frac{\partial \bar{f}_s}{\partial h} \sim t^{\beta_s} \qquad \beta_s = \frac{d-1-y_h}{y_t}.$$

2.1.3.4 Perturbációk, relevancia-irrelevancia kritériumok

A (2.1) Ising Hamilton-operátorban a helyfüggő J_{ij} csatolási állandókon keresztül bevezetve a perturbációkat ($H = 0$ mellett) az utóbbi években egyik leggyakrabban vizsgált inhomogén spinrendszert kapjuk. A perturbációk kritikus viselkedésre gyakorolt hatását különböző relevancia-irrelevancia kritériumok írják le, hasonló szóhasználat, mint a renormálási csoport elméletben. Véletlen kötésű rendszerekre Harris [22] dolgozott ki egy heurisztikus kritériumot, amely a tiszta rendszer fajhő exponensével hozza kapcsolatba a kritikus tulajdonságok megváltozását. Ennek analógiájára Luck [62][63] általánosította az eredményt aperiodikus struktúrákra. Itt röviden ismertetem az eredeti gondolatmeneteket és eredményeiket.

Harris-kritérium: Tételezzünk fel gyenge hígítást a J_{ij} kötésekben: $J_{ij} = J_0(1 + \epsilon_{ij})$, ahol J_0 az átlagos kötéserősség. Az ϵ_{ij} egymástól független valószínűségi változók, amelyekre $\bar{\epsilon} = 0$ és $\overline{\epsilon^2} = \Delta^2 \ll 1$.

A tiszta rendszer ($\Delta = 0$) kritikus pontja közelében egy $s_{i,j}$ spinnel korrelációban levő spinek száma a ξ^d korrelációs tartománnyal arányosan divergál. Gyenge perturbáció hatására a tipikus J átlagos csatolás ebben a tartományban $(J - J_0)/J_0 \sim \xi^{-d/2} \Delta$. Ez a lokális csatolási állandó változás — arányosan — elmozdítja a kritikus hőmérsékletet is: $\delta t \sim |t|^{d\nu/2} \Delta$, amelyet a kritikus ponttól való távolsággal kell összehasonlítani:

$$\frac{\delta t}{t} \sim |t|^{d\nu/2-1} \Delta,$$

amelyből leolvasható — figyelembe véve a (2.15) hiperskálátörvényt —, hogy

$$\alpha = 2 - d\nu > 0$$

esetén releváns a perturbáció, hiszen ebben az esetben a minta bizonyos részeiben az effektív hőmérséklet T_c alatti, így ott mágneses rendeződés van, míg máshol nincs, hiszen az effektív hőmérséklet T_c feletti. Az $\alpha < 0$ esetben az effektív hőmérséklet a mintában gyakorlatilag azonos, a perturbáció hatása irreleváns. $\alpha = 0$ a marginális eset, amikor is további vizsgálódásra van szükség.

Luck-kritérium: Legyen a rendszer L lineáris méretű Ω tartományában $B(\Omega)$ számú kötés, és $\Sigma(\Omega) = \sum_{\langle i,j \rangle \in \Omega} J_{ij}$ a megfelelő kötésekhez tartozó csatolási állandók összege. A $\Sigma(\Omega)/B(\Omega)$ arány a J_0 átlagos csatolási állandóhoz tart — definíció szerint — a termodinamikai határestben ($L \rightarrow \infty$). Egy nagy, de véges tartományra

$$\Sigma(\Omega) - J_0 B(\Omega) \sim L^{d\omega},$$

ahol ω az aperiodicitás *fluktuációs* vagy *vándorlási exponense*. $\omega < 0$ esetben a perturbáció korlátos, míg $\omega > 0$ esetén nem korlátos. A gyenge aperiodikus moduláció hatása a kritikus pont közelében a következőképpen becsülhető meg: $(J - J_0)/J_0 \sim (\xi^{d\omega}/\xi^d) \Delta$, ahol most Δ az aperiodikus moduláció amplitúdója. Ebben a korrelációs tartományban az átlagos csatolási állandó értékének eltolódása miatt a lokális hőmérséklet eltolódása és a kritikus hőmérséklettől való távolság aránya:

$$\frac{\delta t}{t} \sim |t|^{d\nu(1-\omega)-1} \Delta,$$

amelyből a

$$\phi = 1 + d\nu(\omega - 1) \quad (2.16)$$

„crossover” exponens tartalmaz hasonló információt, mint a Harris-kritérium esetén a fajhő exponens. A perturbáció releváns (irreleváns) ha $\phi > 0$ ($\phi < 0$) és marginális $\phi = 0$ esetén.

2.1.3.5 Konform invariancia

A '80-as évek közepén ismerték fel, hogy bizonyos rövidtávú kölcsönhatással rendelkező rendszerek a kritikus pontjukban nemcsak skálainvariánsak, hanem a konform invariancia tulajdonságaival is rendelkeznek [10]. A konform transzformációban

$\vec{r} \rightarrow \vec{r}'(\vec{r})$ a hosszúság újraskálázó faktora $b(\vec{r})$ a hely síma függvénye, nyújtás, forgatás és eltolás kombinálásával áll elő. A transzformáció Jakobi determinánsa $b(\vec{r})^{-d} = \det(\partial \vec{r}' / \partial \vec{r})$. A transzformáció a skálázás általánosításának tekinthető, amelynek során a rács struktúrája lokálisan megőrződik. A kétpont korrelációs függvény a skálázás során megszokottakhoz hasonlóan transzformálódik:

$$\langle \psi(\vec{r}_1) \psi(\vec{r}_2) \rangle = b(\vec{r}_1)^{-x} b(\vec{r}_2)^{-x} \langle \psi(\vec{r}_1') \psi(\vec{r}_2') \rangle. \quad (2.17)$$

A konform invariancia módszere kétdimenzióban különösen hatékony, hiszen itt a konform csoport sokkal gazdagabb, mint magasabb dimenziókban, izomorf a komplex analitikus függvények csoportjával. Itt meghatározhatók a kritikus exponensek lehetséges értékei a rendszerek bizonyos osztályaira.

Kétdimenzióban két különböző geometriájú rendszer közötti leképezésre a komplex leképezés használható. Ha az egyik rendszerben ismerjük a kritikus korrelációt, akkor ezeket átranszformálhatjuk a másikba. A lokális dilatációs faktor $b(z) = |dw/dz|^{-1}$. Így a síknak L szélességű periodikus csíkra (hengerre) való leképezését adja a logaritmikus transzformáció

$$w = \frac{L}{2\pi} \ln z.$$

A $w = (u, v)$ u komponense a csíkmenti távolság, amely a z síkbeli távolság logaritmus, v a transzverz irányú távolság, a z síkon a valós tengellyel bezárt szög konstansszorosa. A (2.17) korrelációs függvény az új koordinátákban:

$$\langle \psi(u_1, v_1) \psi(u_2, v_2) \rangle = \frac{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^{2x}}{\left(2 \cosh \frac{2\pi}{L}(u_1 - u_2) - 2 \cos \frac{2\pi}{L}(v_1 - v_2)\right)^x},$$

amely az $|u_1 - u_2| \gg L$ nagy távolságokban a

$$\langle \psi(u_1, v_1) \psi(u_2, v_2) \rangle \sim \left(\frac{2\pi}{L}\right)^{2x} e^{-(2\pi x/L)|u_1 - u_2|}$$

exponenciális lecsengést mutatja, amelyből a korrelációs hossz a csík mentén

$$\xi = \frac{L}{2\pi x},$$

amely a konform invariancia legfontosabb eredményei közé tartozik, hiszen adott csík-

szélesség mellett egyértelmű kapcsolatba hozza a skáladimenziót a korrelációs hosszal, amely — ahogy a későbbiekben látható lesz — a transzfermátrixból számolható.

2.2 Számolási technikák

2.2.1 Transzfermátrix módszer

A transzfermátrix módszer segítségével egy rendszer állapotösszegét mátrixok szorzatának nyomaként írhatjuk. A rendszer termodinamikai tulajdonságai a mátrix spektrumának elemeivel fejezhetők ki. A szabadenergia — termodinamikai határesetben — a mátrix legnagyobb sajátértékétől függ, a korrelációs hossz a két legnagyobb sajátérték függvénye.

A módszer jól alkalmazható például egydimenziós rövidtávú kölcsönhatással rendelkező spinrendszerek, illetve ezzel analóg véletlen bolyongó problémák megoldására.

Egyszerű példa az egydimenziós homogén Ising-lánc:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - H \sum_i s_i, \quad (2.18)$$

amelynek partíciós függvénye periodikus határfeltételek mellett

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{s\}} e^{\beta J (s_0 s_1 + s_1 s_2 + \dots + s_{N-1} s_0) + \beta H (s_0 + s_1 + \dots + s_{N-1})} = \sum_{\{s\}} \mathbf{T}_{0,1} \mathbf{T}_{1,2} \dots \mathbf{T}_{N-1,0}, \quad (2.19)$$

ahol $\{s\}$ jelöli, hogy az összegzés végigfut a rendszer összes lehetséges állapotán: $s_i = \pm 1$ minden s_i spinre, és leolvasható, hogy

$$\mathbf{T}_{i,i+1} = e^{\beta J s_i s_{i+1} + \beta H (s_i + s_{i+1})/2} \quad (2.20)$$

egy mátrix elemei, amelyben $s_i = +1$ és -1 -hez tartozó értékek vannak a mátrix sorai-ban és $s_{i+1} = +1$ és -1 -hez tartozók az oszlopaiban:

$$\mathbf{T}_{i,i+1} = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+H)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-H)} \end{pmatrix}. \quad (2.21)$$

Így az N spinből álló rendszer állapotösszege a T mátrix N -edik hatványának nyoma:

$$\mathcal{Z}_N = \sum_{s_0=\pm 1} (T^N)_{0,0}, \quad (2.22)$$

és mivel a mátrix nyoma független a bázis választástól

$$\mathcal{Z}_N = \sum_i \Lambda_i^N, \quad (2.23)$$

— ahol Λ_i -k a transzfermátrix sajátértékei — ami a példától elvonatkoztatva is érvényes általános eredmény.

A transzfermátrix módszer eredményessége a mátrix méretétől és analitikus vagy gyakran numerikus diagonalizálhatóságától függ. A mátrix mérete az egydimenziós Ising-modell esetén láthatóan 2×2 -es, egy q állapotú Potts-modell esetében $q \times q$, a kétdimenziós N szélességű Ising-modell esetében $2^N \times 2^N$ legközelebbi szomszéd kölcsönhatást feltételezve. A módszer szemléletes képet ad az újabb és újabb spinek figyelembe vételéről, ahogy a következő mátrixszal való szorzás egy új spint épít a rendszerhez a megfelelő csatolással.

Ha egy $N \times N$ -es transzfermátrix sajátértékei növekvő sorrendben $\Lambda_1, \Lambda_2, \dots, \Lambda_N$, akkor a termodinamikai határesetben a szabadenergia-sűrűség

$$f = -kT \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \mathcal{Z}_N \quad (2.24)$$

$$= -kT \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \left\{ \Lambda_1^N \left(1 + \sum_i \frac{\Lambda_i^N}{\Lambda_1^N} \right) \right\}. \quad (2.25)$$

A logaritmusbeli szumma a termodinamikai határesetben zérushoz tart, így

$$f = -kT \ln \Lambda_1 \quad (2.26)$$

csak a legnagyobb sajátértéktől függ. Hasonló módon a korrelációs hossz

$$\xi^{-1} = -\ln(\Lambda_2/\Lambda_1) \quad (2.27)$$

a két legnagyobb sajátérték függvénye. A fentiekből látható a transzfermátrix módszer nagy előnye, hogy elegendő megtudni a mátrix legnagyobb sajátértékeit a rendszer tulajdonságainak meghatározásához, ami nyilván sokkal kisebb feladat, mint a teljes spektrum meghatározása.

2.2.1.1 Ising-lánc transzverz térben (szabad fermion leírás)

A kvantummechanika Feynman-propagátoros megfogalmazása és a statisztikus fizika transzfermátrix formalizmusának formális hasonlósága [52] lehetővé teszi, hogy a d dimenziós klasszikus rendszerekhez $d - 1$ dimenziós kvantumoz rendszert társítsunk.

A kétdimenziós, réteges Ising-modellt külső tér nélkül a következő Hamilton-operátor írja le:

$$-\beta\mathcal{H} = \sum_{n,k} [K_1(k)s_{n,k}s_{n+1,k} + K_2(k)s_{n,k}s_{n,k+1}] , \quad (2.28)$$

ahol $K_1(k)$ -k a vertikális csatolási állandók, $K_2(k)$ -k pedig a horizontálisak, $s_{n,k}$ -k klasszikus spin változók ± 1 értékeket vehetnek fel és $\beta = 1/kT$. Ez a kifejezés felírható az egyes sorok Hamilton-operátorainak összegeként:

$$\mathcal{H} = \sum_n \mathcal{H}(n, n+1) \quad , \quad s_n = (s_{n,1}, s_{n,2}, \dots, s_{n,K}) .$$

A rendszer kanonikus állapotösszege — ha n irányban periodikus határfeltételt veszünk — így egy mátrix nyomaként írható, analóg módon az előző pontbeli egydimenziós esettel:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \sum_{s_1, s_2, \dots, s_N} e^{-\beta\mathcal{H}} = \sum_{s_1, s_2, \dots, s_N} \prod_n e^{-\beta\mathcal{H}(s_n, s_{n+1})} \\ &= \sum_{s_1, s_2, \dots, s_N} \mathbf{T}_{s_1, s_2} \mathbf{T}_{s_2, s_3} \dots \mathbf{T}_{s_N, s_1} = \text{Tr}(\mathbf{T}^N) \quad , \end{aligned}$$

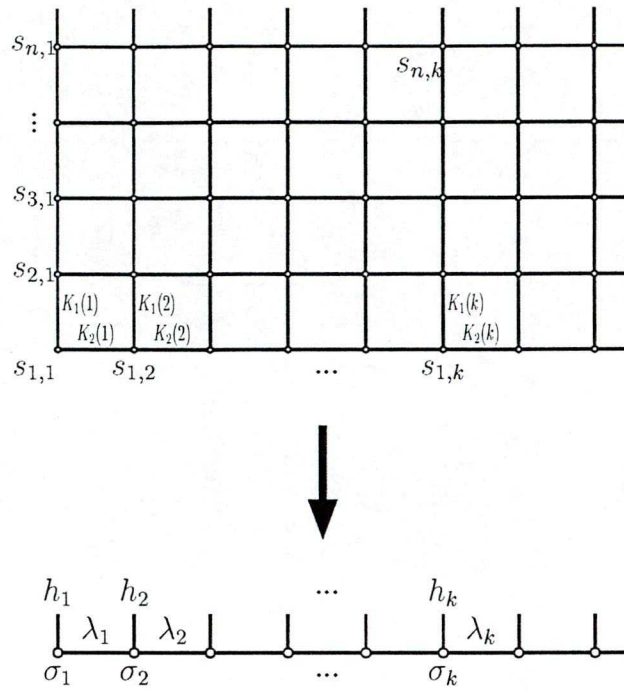
ahol $\mathbf{T}_{s_i, s_{i+1}} = e^{-\beta\mathcal{H}(s_i, s_{i+1})}$ a $\mathbf{T}$ mátrix elemei adott s_i, s_{i+1} spinkonfigurációk mellett a megfelelő sorokban.

Feltételezve, hogy a rács pontjaiban az $s_{n,k}$ spinváltozók a $\sigma_{n,k}^z$ spinmátrixok sajátértékeit vehetik fel, a $\mathbf{T}$ mátrix ezen Pauli-mátrixok sajátvektorai direktszorzat-bázisán

$$|s_n\rangle = |s_{n,1}\rangle |s_{n,2}\rangle \dots |s_{n,K}\rangle$$

két mátrix szorzataként írható:

$$\mathbf{T} = V_2 V_1 \quad ,$$



2.1 ábra: A kétdimenziós anizotróp Ising-modell és a megfelelő transzverzterbeli kvantum Ising-modell.

ahol V_2 egy diagonális mátrix, amelynek mátrixelemei:

$$\langle s_n | V_2 | s_{n+1} \rangle = \delta_{s_{n,1}, s_{n+1,1}} \delta_{s_{n,2}, s_{n+1,2}} \cdots \delta_{s_{n,K}, s_{n+1,K}} \exp \left(\sum_k K_2(k) s_{n,k} s_{n,k+1} \right),$$

amely így:

$$V_2 = \exp \left(\sum_k K_2(k) \sigma_k^z \sigma_{k+1}^z \right)$$

mátrix alakba írható. A V_1 mátrix K darab azonos alakú mátrix direkt szorzata, hiszen mátrixelemei:

$$\langle s_n | V_1 | s_{n+1} \rangle = \exp \left(\sum_k K_1(k) s_{n,k} s_{n+1,k} \right),$$

és így egy v_k mátrix, amelynek mátrixelemei $\langle s_{n,k} | v_k | s_{n+1,k} \rangle$ -k:

$$v_k = \begin{pmatrix} e^{K_1(k)} & e^{-K_1(k)} \\ e^{-K_1(k)} & e^{K_1(k)} \end{pmatrix}$$

alakú, amely felhasználva a σ^x Pauli-mátrix $(\sigma^x)^l = \mathbf{1}$, ha l páros, tulajdonságát

$$e^{a\sigma^x} = \mathbf{1} \cosh a + \sigma^x \sinh a = \cosh a (\mathbf{1} + \sigma^x \tanh a)$$

és a $K_1^*(k)$ duális csatolásokat a $\tanh K_1^*(k) = e^{-2K_1(k)}$ módon definiálva kapjuk, hogy:

$$v_k = e^{K_1(k)} (\mathbf{1} + \sigma_k^x e^{-2K_1(k)}) = (2 \sinh 2K_1(k))^{1/2} e^{K_1^*(k) \sigma_k^x}$$

formába is írható. A v_k -k direktszorzatából kapjuk, hogy

$$V_1 = \exp \left(\sum_k K_1^*(k) \sigma_k^x \right)$$

és a rendszer állapotösszege a V_1, V_2 operátorokkal:

$$\mathcal{Z} = \prod_k (2 \sinh 2K_1(k))^{N/2} \text{Tr}(V_2 V_1)^N.$$

Így a transzferoperátort definiálhatjuk a következőképpen:

$$\mathbf{T}' = V_2 V_1 = \exp \left(\sum_k K_2(k) \sigma_k^z \sigma_{k+1}^z \right) \exp \left(\sum_k K_1^*(k) \sigma_k^x \right). \quad (2.29)$$

Az extrém anizotróp határesetben, amikor $K_2(k) \rightarrow 0$ és $K_1(k) \rightarrow \infty$ (és így az időtengely irányában a csatolás erős, míg a tértengely irányában gyenge) a kötések arányát $(K_2(k)/K_1^*(k))$ -ot fixen tartva kapjuk az ún. hamiltoni határesetet, amelyben a transzferoperátor $\exp(-2K_1^* \mathcal{H}')$ alakban írható — ahol K_1^* egy referencia konstans —, és ezt első rendben kifejtve kapjuk, hogy

$$\mathbf{T}' = \mathbf{1} - 2K_1^* \mathcal{H}' + \dots,$$

amelyben $\mathcal{H}'$ a feles spinű transzverzálbeli Ising-lánc Hamilton-operátora:

$$\mathcal{H}' = -\frac{1}{2} \sum_k (\lambda_k \sigma_k^z \sigma_{k+1}^z + h_k \sigma_k^x), \quad (2.30)$$

ahol $\lambda_k = K_2(k)/K_1^*$, $h_k = K_1^*(k)/K_1^*$.

A fentiekből leolvasható, hogy a kétdimenziós Ising-modell és a kvantum spinlánc — ebben az esetben — megfeleltethető egymásnak, hiszen a transzferoperátor sajátértékei és sajátállapotai megegyeznek a kvantum spinláncéval. Másodrendű fázisátalakulás esetén a korrelációs hossz inverze arányos a spinlánc első energiagapjével (2.27)(2.29)(4.53):

$$\frac{1}{\xi} \sim E_1 - E_0 \quad (2.31)$$

A (2.30) Hamilton-operátort a

$$\sigma^x \rightarrow \sigma^z \quad (2.32)$$

$$\sigma^z \rightarrow -\sigma^x \quad (2.33)$$

kanonikus transzformációval a szokásos [73]

$$\mathcal{H}' = -\frac{1}{2} \sum_k (h_k \sigma_k^z + \lambda_k \sigma_k^x \sigma_{k+1}^x) \quad (2.34)$$

alakban írhatjuk. Ez a Hamilton-operátor egzaktul diagonalizálható és a teljes sajátérték spektrumot és a sajátfüggvényeket megkaphatjuk egy Jordan-Wigner-transzformáció [45] segítségével, amelyben a spin operátorok helyett fermion operátorok lépnek be [59].

Bevezetve a $\sigma_k^\pm$ léptető operátorokat:

$$\sigma_k^\pm = \frac{1}{2}(\sigma_k^x \pm i\sigma_k^y)$$

a Jordan-Wigner-transzformáció [45] létrehozza a:

$$c_k^\dagger = \sigma_k^+ \prod_{i=1}^{k-1} \exp(-i\pi \sigma_i^+ \sigma_i^-)$$

$$c_k = \prod_{i=1}^{k-1} \exp(i\pi \sigma_i^+ \sigma_i^-) \sigma_k^-$$



operátorokat, amelyek már teljesítik a szokásos fermion antikommutációs relációkat. A kvantum lánc Hamilton-operátora szabad határfeltétel mellett

$$\mathcal{H} = - \sum_{k=1}^K h_k (c_k^+ c_k - \frac{1}{2}) - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{K-1} \lambda_k (c_k^+ - c_k)(c_{k+1}^+ + c_{k+1}) \quad (2.35)$$

alakú, amely a fermion operátorokban kvadratikus, így egy Bogoljubov transzformáció [9] segítségével diagonalizálható. A diagonális bázisban az új fermion operátorok:

$$\begin{aligned} \eta_q^+ &= \sum_j (g_{qj} c_j^+ + h_{qj} c_j) \\ \eta_q &= \sum_j (g_{qj} c_j + h_{qj} c_j^+) \end{aligned} \quad ,$$

amelyekkel a rendszer Hamilton-operátora:

$$\mathcal{H} = \sum_q \Lambda_q (\eta_q^+ \eta_q - \frac{1}{2}) \quad (2.36)$$

lesz, ahol Λ_q kielégíti a következő mátrix egyenleteket:

$$(\mathbf{A} - \mathbf{B})\Psi_q = \Lambda_q \Phi_q \quad (2.37)$$

$$(\mathbf{A} + \mathbf{B})\Phi_q = \Lambda_q \Psi_q \quad (2.38)$$

Az $\mathbf{A}$ mátrix a $c_k^+ c_k$ és $c_k c_k^+$ alakú tagok, az $\frac{1}{2}\mathbf{B}$ mátrix a $c_k^+ c_{k+1}^+$ és $c_k c_{k+1}$ alakú tagok együtthatóit tartalmazza a (2.35) Hamilton-operátorból. Mindkét mátrix a legközelebbi szomszéd kölcsönhatások miatt tridiagonális, továbbá valós és $\mathbf{A}$ szimmetrikus, $\mathbf{B}$ pedig antiszimmetrikus. A Ψ_q és Φ_q vektorok komponenseit

$$\Psi_q(j) = g_{qj} - h_{qj}$$

$$\Phi_q(j) = g_{qj} + h_{qj}$$

relációk definiálják.

A (2.37-2.38) mátrix egyenleteket kombinálva a következő sajátérték egyenlethez jutunk

$$(\mathbf{A} - \mathbf{B})(\mathbf{A} + \mathbf{B})\Phi_q = \Lambda_q^2 \Phi_q.$$

Így a probléma az eredeti $2^K \times 2^K$ mátrix diagonalizálása helyett egy $K \times K$ méretű

tridiagonális szimmetrikus mátrix (t.i. $(\mathbf{A} - \mathbf{B})(\mathbf{A} + \mathbf{B})$) sajátértékproblémájára egyszerűsödik.

A transzverz Ising-lánc kritikus pontja: Az Ising-lánc kritikus pontját — a fentiek szerint — akkor kapjuk, amikor az energiagap zérussá válik, és így az alapállapot degenerálttá válik az első gerjesztett állapottal. Ekkor a korrelációs hossz divergál.

A Λ_q gerjesztési spektrumot a

$$\det((\mathbf{A} - \mathbf{B})(\mathbf{A} + \mathbf{B}) - \Lambda_q^2 \mathbf{1}) = 0$$

sajátérték egyenlet határozza meg, amelyben az $\mathbf{A} + \mathbf{B}$ és $\mathbf{A} - \mathbf{B}$ mátrixok:

$$\mathbf{A} - \mathbf{B} = (\mathbf{A} + \mathbf{B})^T = \begin{pmatrix} h_1 & 0 & \dots & \lambda_k \\ \lambda_1 & h_2 & 0 & \\ 0 & \lambda_2 & h_3 & \ddots \\ & & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & & 0 \\ 0 & \dots & \lambda_{k-1} & h_k \end{pmatrix} \quad (2.39)$$

periodikus határfeltételt feltételezve, amely $K \rightarrow \infty$ esetben megegyezik a szabad határfeltétellel.

A sajátérték egyenlet $\Lambda_q = 0$ megoldása esetén, amikor $\det((\mathbf{A} - \mathbf{B})(\mathbf{A} + \mathbf{B})) = 0$

$$\det(\mathbf{A} - \mathbf{B}) = \det(\mathbf{A} + \mathbf{B}) = \prod_{k=1}^K h_k - \prod_{k=1}^K \lambda_k$$

és így a kritikus feltétel [74]:

$$\lim_{K \rightarrow \infty} \prod_{k=1}^K \left(\frac{\lambda_k}{h_k} \right)_c = 1, \quad (2.40)$$

amely $h_k \equiv 1$ és $\lambda_k \equiv \lambda$ esetén a homogén lánc $\lambda = \lambda_c = 1$ kritikus csatolását adja, a lánc zérus hőmérsékletén. A $\lambda < 1$ a rendezetlen fázis a homogén rendszerben, míg a $\lambda > 1$ csatolású esetben a rendszer a rendezett állapotában van.

Felületi mágnesezettség: A kétdimeziós Ising-modellből [80] kiindulva ismert, hogy H/β külső tér esetén a (2.28)-ben $-\beta\mathcal{H}$ -hoz egy $H\sigma_{n,k}^z$ tagot hozzávéve egy

$$V_3 = \exp \left(\sum_k H \sigma_k^z \right)$$

diagonális mátrixszal szorozódik az eredeti $\mathbf{T}'$ transzfermátrix, amely kis tér esetén a [106]

$$\mathbf{T}'(H) = \mathbf{T}' + H \sum_k \sigma_k^z \mathbf{T}'$$

alakú külső tértől is függő transzfermátrix lesz. A $T < T_c$ hőmérsékleten a legnagyobb sajátértékhez tartozó sajátvektor — a $K \rightarrow \infty$ limeszben — degenerálttá vált. A külső tér hatására ez a degeneráció felhasad és a legnagyobb sajátérték exponenciálisában elsőrendben megjelenik a külső mágneses tér és így a szabadenergiában is [106][80]. Végrehajtva az extrém anizotróp limeszt és véve a (2.32-2.33) kanonikus transzformációt a felületi mágnesezettség:

$$m_s = m_1 = \langle 1 | \sigma_1^x | 0 \rangle ,$$

ahol $|0\rangle$ a $\mathcal{H}'$ alapállapota, $|1\rangle = \eta_1^+ |0\rangle$ az első gerjesztett állapot. A σ_1^x -et felírva az η_k^+ , η_k fermion operátorokban

$$m_1 = \langle 0 | \eta_1 A_1 | 0 \rangle ,$$

ahol

$$A_1 = \sum_q \Phi_q(1)(\eta_q^+ + \eta_q)$$

és így a felületi mágnesezettség

$$m_s = \Phi_1(1) .$$

A kritikus hőmérséklet alatt, $T < T_c$, $\Lambda_1 = E_1 - E_0 = 0$ és így (2.38) alapján

$$(\mathbf{A} + \mathbf{B})\Phi_1 = 0 ,$$

amelyből (2.39) segítségével $\Phi_1(j)$ -re rekurziós egyenleteket kapunk

$$\Phi_1(j) = \prod_{k=1}^{j-1} \left(-\frac{h_k}{\lambda_k} \right) \Phi_1(1),$$

amiből a felületi mágnesezettség explicit módon kifejezhető [71], tekintve, hogy Φ_1 normált

$$m_s = \Phi_1(1) = \left(1 + \sum_{j=1}^{\infty} \prod_{k=1}^j \left(\frac{\lambda_k}{h_k} \right)^{-2} \right)^{-1/2} \quad (2.41)$$

Ez alapján tetszőleges kötéselosztás esetén meghatározható az Ising-lánc felületi mágnesezettsége.

2.2.2 Monte Carlo-módszerek

A statisztikus fizika egyik alapvető számítógépes vizsgálati módszere, az először az '50-es években alkalmazott Monte Carlo-szimuláció. A klasszikus Monte Carlo-algoritmusok közül az elsőt — a Metropolis-algoritmust [68] — folyadékok modellezésére használták először, de spinrácsok, polimerek, rendezetlen rendszerek statisztikus fizikai tulajdonságainak meghatározására és rácsmértékelméletekben való vizsgálatokra is alkalmasnak bizonyult. A '80-as évek nagy felfedezése a spinrácsokra és rácsmértékelméletekben alkalmazható modern Swendsen-Wang [91] és Wolff-féle [104][105] klaszterflip algoritmusok.

Statisztikus fizikai szempontból az energia, mágnesezettség stb. (2.3) alapján való meghatározása a cél. Ezt az átlagot már egy kis rendszer esetén is nehéz egzaktul meghatározni, hiszen pl. egy N részecskéből álló Ising-modell esetén is 2^N féle spinkonfigurációra kellene összegezni. $N = 1000$ esetén is már lehetetlenség a teljes összegzést elvégezni.

Ha nem végezzük el a teljes összegzést, hanem véletlenszerűen választunk ki fázistérbeli pontokat, amelyek Boltzmann-faktorát az összegben hagyjuk, akkor sem kapunk megfelelő eredményt, hiszen a termodinamikai mennyiségek valószínűségi eloszlása a fázistérben az átlagérték körül rendkívül erős csúcsot mutat, így az érdekes tartományból csak nagyon ritkán kerül kiválasztásra fázispont. Ezért az (2.3)-beli

összegzés helyett egyszerű

$$\langle A \rangle_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n A_{r_i} \quad (2.42)$$

átlagképzés történik oly módon, hogy r -et gyakrabban választjuk a termodinamikai egyensúly körüli tartományból (importance sampling).

Generálható olyan Markov-folyamat, amelyben $\langle A \rangle_n$ az A átlaga az n egymás után következő állapotban, konvergál a (2.3)-beli termodinamikai átlaghoz

$$\langle A \rangle_n = \langle A \rangle + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right). \quad (2.43)$$

Az $n \rightarrow \infty$ határesetben minden r állapot a maga $e^{-\beta E_r}$ Boltzmann-faktorával lesz súlyozva. A Markov-láncnak az a tulajdonsága, hogy az egymás után következő állapotok mindegyike csak az előző állapottól függ, és így az állapotok erősen korreláltak, lassabbá teszi az eljárást, mint ha ezek egymástól függetlenek lennének. Az $r \rightarrow r'$ átmenet a modelltől és az algoritmustól függően többféle lehet: pl. az Ising-modell esetében egy spin árfordítása (single spin flip), két szomszédos spin cseréje, vagy spinnek nagy klaszterjének átfordítása (cluster flip).

A folyamatoknak ergodikusaknak kell lenniük, minden állapot elérhető kell legyen. Ez spinrácsokra általában teljesül is, míg bizonyos polimerrendszerek esetén (self-avoiding walk) problémát jelent, bár a tapasztalat szerint végeredményben nem okoz eltérést.

További (elegendő) feltétel, hogy a folyamatnak ki kell elégítenie a részletes egyensúly (detailed balance) elvét

$$P_r W_{r \rightarrow r'} = P_{r'} W_{r' \rightarrow r}, \quad (2.44)$$

ahol P_r az r állapotban tartózkodás valószínűsége, $W_{r \rightarrow r'}$ az r állapotból az r' -be való átmenet valószínűsége. A fenti feltétel nem határozza meg az átmeneti valószínűséget egyértelműen. A $W_{r_i \rightarrow r_{i+1}}$ átmeneti valószínűséget úgy kell megválasztani, hogy az $r_1 \rightarrow r_2 \rightarrow \dots \rightarrow r_n$ minta az $n \rightarrow \infty$ határesetben a kanonikus eloszlást mutassa.

A Metropolis-algoritmus [68] a két állapot energiakülönbségével fejezi ki az átmeneti valószínűséget ($\delta E = E_{r'} - E_r$):

$$W_{r \rightarrow r'} = \begin{cases} 1 & , \text{ ha } \delta E \leq 0 \\ e^{-\beta \delta E} & , \text{ ha } \delta E > 0. \end{cases} \quad (2.45)$$

Ez a választás nyilván kielégíti az (2.44) részletes egyensúlyt, hiszen ha nagyszámú Markov-folyamatot tekintünk, és egy adott lépésben N_r rendszer van az r állapotban, és $N_{r'}$ az r' állapotban és $E_r < E_{r'}$, akkor

$$W_{r \rightarrow r'} = e^{-\beta(E_{r'} - E_r)} \quad (2.46)$$

$$W_{r' \rightarrow r} = 1. \quad (2.47)$$

Az r állapotból az r' -be átlépők száma ennél a lépésnél

$$N_{r \rightarrow r'} = N_r W_{r \rightarrow r'} = N_r e^{-\beta(E_{r'} - E_r)}, \quad (2.48)$$

illetve a fordított átmeneté

$$N_{r' \rightarrow r} = N_{r'} W_{r' \rightarrow r} = N_{r'}. \quad (2.49)$$

Így az r állapotban levő folyamatok számának változása a Markov-folyamatok következő lépésére, az r' -be való átmenet, illetve az onnan r -be való átmenet együttes hatására:

$$\Delta N_{r \rightarrow r'} = N_{r \rightarrow r'} - N_{r' \rightarrow r} = N_r \left(\frac{e^{-\beta E_{r'}}}{e^{-\beta E_r}} - \frac{N_{r'}}{N_r} \right), \quad (2.50)$$

amiből leolvasható, hogy ha az adott lépésben fennállt a kanonikus eloszlás, akkor az nem is változott, ha viszont az r állapotban kevesebb rendszer volt, mint ahogy a kanonikus eloszlás szerint kellett volna, akkor $\Delta N_{r \rightarrow r'}$ negatív és r' állapotból r -be több átmenet létesül, mint fordítva. És ugyanaz történik ellenkező előjellel, ha r állapotban több rendszer volt, mint a kanonikus eloszlásnak megfelelő.

A Metropolis-hoz hasonló klasszikus módszer a „heat bath” algoritmus, amely esetén a rendszer egy adott l szabadsági fokához rendelünk új α_l' értéket tekintet nélkül annak előző α_l értékére. Ez a próbálépés a következő átmeneti valószínűséggel történik meg:

$$W_{r \rightarrow r'} = \frac{e^{-\beta E_l(\alpha_l')}}{\sum_{\alpha_l} e^{-\beta E_l(\alpha_l)}}, \quad (2.51)$$

ahol $E_l(\alpha_l')$ a helyi energiája az α_l szabadsági foknak, és a nevezőben az összegzés az l -ik szabadsági fok lehetséges értékeire történik. A részletes egyensúlyt ez az eljárás triviálisan kielégíti. Az is látható azonban, hogy minden lépésben több exponenciális tagot kell kiértékelni, ami a Metropolis-eljárásnál lassabbá teszi, így ma már főként

történeti jelentőséggel bír a módszer.

A klaszterflip módszerek [98] nagy előnye a kritikus állapothoz közeli hőmérsékleteken is megtartott gyorsaságukban rejlik. A kritikus jelenségek Monte Carlo-módszerrel történő vizsgálatát erősen akadályozta az ún. kritikus lelassulás. Ahogy a kritikus ponthoz közeledünk, a Markov-láncban egymásután következő lépések egyre hosszabb szekvenciája korrelál, az ezt jellemző τ korrelációs idő a következőképpen divergál

$$\tau \sim \xi^z, \quad (2.52)$$

ahol ξ a korrelációs hossz, és z a dinamikai exponens.

A számítógépes szimulációkban a korreláció nem divergál, de növekszik a rendszer méretével

$$\tau \sim L^z, \quad (2.53)$$

ahol L a rendszer lineáris mérete. A legtöbb Monte Carlo-algoritmus esetén $z \approx 2$, így τ nagy rendszerekre gyorsan nő. A konfigurációk statisztikailag nem függetlenek egy τ időintervallumon belül, így nagyban megnő a (2.42) egyenletben számolt mennyiségek statisztikus hibája. Ennek a problémának a kiküszöbölése nagyon fontos a nagy pontosságú Monte Carlo-számolásoknál. A kritikus lelassulás oka a klasszikus Monte Carlo-algoritmusoknál abból származik, hogy lokálisak, a változások diffúzió jellegűen terjednek.

Az első nem lokális updatinggel működő módszer a Swendsen–Wang-féle [98] klaszterflip algoritmus, ami egy — a Potts-modell és a perkolációs probléma közötti — leképezésen alapszik [91]. A legegyszerűbben a Potts-modell

$$\mathcal{H} = K \sum_{\langle i,j \rangle} (\delta_{s_i, s_j} - 1) \quad (2.54)$$

Hamilton-operátora segítségével írható le a leképezés. Itt K már tartalmazza a $-1/kT$ faktort. A partíciós függvény

$$\mathcal{Z} = \text{Tr}_{\{s\}} e^{\mathcal{H}}. \quad (2.55)$$

Fortuin és Kasteleyn [18] gondolatmenetét követve egy l és m közötti kölcsönhatást



eltávolítunk a Hamilton-operátorból

$$\mathcal{H}_{\langle l,m \rangle} = K \sum_{\langle i,j \rangle \neq \langle l,m \rangle} (\delta_{s_i, s_j} - 1), \quad (2.56)$$

és így kétféle összeget írhatunk fel az l és m spinek relatív helyzete szerint²:

$$\mathcal{Z}_{\langle l,m \rangle}^{\uparrow\uparrow} = \text{Tre}^{\mathcal{H}_{\langle l,m \rangle}} \delta_{s_l, s_m} \quad (2.57)$$

és

$$\mathcal{Z}_{\langle l,m \rangle}^{\uparrow\downarrow} = \text{Tre}^{\mathcal{H}_{\langle l,m \rangle}} (1 - \delta_{s_l, s_m}) \quad (2.58)$$

és így

$$\mathcal{Z} = \mathcal{Z}_{\langle l,m \rangle}^{\uparrow\uparrow} + e^{-K} \mathcal{Z}_{\langle l,m \rangle}^{\uparrow\downarrow}. \quad (2.59)$$

Ez a következőképpen is írható:

$$\mathcal{Z} = (1 - e^{-K}) \mathcal{Z}_{\langle l,m \rangle}^{\uparrow\uparrow} + e^{-K} (\mathcal{Z}_{\langle l,m \rangle}^{\uparrow\uparrow} + \mathcal{Z}_{\langle l,m \rangle}^{\uparrow\downarrow}). \quad (2.60)$$

Az összeg első tagja az l és m spineket egy klaszterbe teszi $p = 1 - e^{-K}$ valószínűséggel, a második tag — függetlenül attól, hogy s_l és s_m azonos vagy különböző — más klaszterekbe teszi $1 - p$ súlyfaktoral. Látható, hogy az egymás mellett álló azonos spinek nem feltétlenül kerülnek egy klaszterbe. Az (2.54)-beli összes kölcsönhatásra megismételve a fenti eljárást a $\mathcal{Z}$ p és $1 - p$ faktorok különböző szorzatainak összegére bomlik. A klaszterek rácspontjai között perkolációs kötések lesznek és minden klaszter egy adott q Potts-állapotban van függetlenül más klaszterek állapotától. Ha egy-egy adott perkolációs kötéskonfigurációban N_c klaszter van, akkor az állapotösszeg

$$\mathcal{Z} = \text{Tr}_{\{n\}} p^b (1 - p)^{dL^d - b} q^{N_c}, \quad (2.61)$$

ahol az összegzés a különböző $\{n\}$ perkolációs kötés konfigurációkra történik, b a perkolációs kötések száma a d dimenziós L lineáris méretű hiperkübös rácsban.

Végrehajtva a Potts-rács $\rightarrow$ perkolációs rács $\rightarrow$ Potts-rács transzformációt egy Monte Carlo-algoritmushoz jutunk, ami kielégíti a részletes egyensúlyt. Tetszőleges Potts-állapotból indulva p valószínűséggel perkolációs kötések teszünk az azonos Potts-

² $\uparrow\uparrow$ megegyező, $\uparrow\downarrow$ nem megegyező irányú spinbeállást jelöl.

spinű rácspontok közé. A nem azonos Potts-spinű szomszédos helyek közé nem tesszünk kötéseket. Ha most töröljük az eredeti kölcsönhatásokat, marad egy perkolációs kötés (klaszter) konfiguráció a (2.61) egyenletben adott súllyal. Megjegyzendő, hogy az eredeti Potts-spin klaszterek kisebb klaszterekre osztódhatnak szét, hiszen az ugyanolyan Potts-spinű rácspontok közé nem mindig kerül perkolációs kötés.

A következő lépésben új, véletlenszerű Potts-spin értékeket adunk minden perkolációs klaszternek és ugyanezt az értéket minden klaszteren belüli rácspontnak. Most eltörölve a perkolációs kötéseket egy új Potts-spin konfigurációt kapunk, ami alapvetően eltérhet az eredetitől, mert nagy klaszterek is új spin értékeket vehetnek fel egyetlen lépésben.

Az eljárás kielégíti a részletes egyensúlyt, hiszen minden két Potts-állapot közötti átmenet valamely perkolációs kötés konfiguráción megy keresztül, aminek a kialakulási valószínűségébe minden perkolációs kötés egy p faktort, és minden perkolációs klaszter — függetlenül a kezdeti Potts-konfigurációtól — egy q faktort tesz. A két Potts-állapot egymásba alakulásának valószínűségének különbsége (aránya) ezen perkolációs kötés konfiguráción keresztül a kiindulási Potts-állapotokban létrejövő hiányzó kötéseknek megfelelő $1 - p = e^{-K}$ faktorok aránya, ami éppen a Hamilton-operátorok különbségének exponenciálisa

$$\frac{W_{s \rightarrow s'}}{W_{s' \rightarrow s}} = e^{\mathcal{H}_{s'} - \mathcal{H}_s} = \frac{P_{s'}}{P_s}, \quad (2.62)$$

amiből a részletes egyensúly leolvasható.

Az eljárás alkalmazható bármilyen rácusra, bárhány dimenzióban, különböző kölcsönhatás erősségek esetén is.

A Wolff-féle egy-klaszterflip algoritmus [105] a Swendsen-Wang-algoritmus továbbfejlesztése. Ebben az esetben egy kezdő spint véletlenszerűen választunk ki. Ennek szomszédait ugyanazzal a valószínűséggel választjuk a klaszter tagjának mint a Swendsen-Wang-algoritmusban:

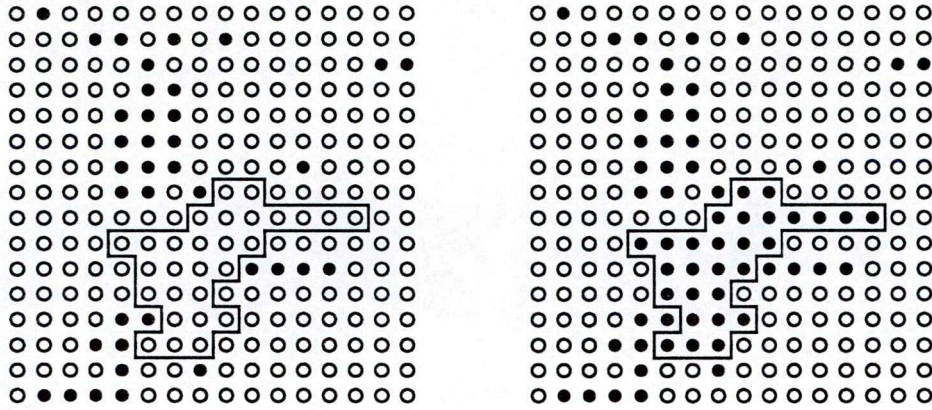
$$p(s_i, s_j) = 1 - e^{-K \delta_{s_i, s_j}}. \quad (2.63)$$

Ezután a klaszterbe került spinek szomszédaira végezzük el ugyanezt a procedúrát, ha az adott párra még nem végeztük el ezt. Az eljárás addig folytatódik, míg már nincs több új csatolható spin a klaszter peremén. Az így kialakuló klaszter spinei $q = 2$ Potts-spinek esetén előjelet váltanak, $q \geq 3$ esetén egyenlő valószínűséggel vehetik fel bármely Potts-értéket.

Az átmeneti valószínűség egy adott C klaszter esetén:

$$W(s \rightarrow s', C) = w_{\text{bulk}}(s, C) \prod_{\langle i, j \rangle \in \partial C} (1 - p(s_i, s_j)), \quad (2.64)$$

ahol ∂C a C felülete, amely azon hiányzó kötéseket tartalmazza, amelyek egy klaszterbeli spint egy nem klaszterbelivel kötnek össze.



2.2 ábra: Klaszter kialakulása a Wolff-algoritmusban kétdimenziós Ising-modellben. Az üres karikák a felfelé, a teli karikák a lefelé állapotot szimbolizálják.

A fordított irányú átmenetben $W(s' \rightarrow s, C)$ a bulk rész a modell szimmetriája miatt ugyanaz, csak a felületi rész különbözik. Az oda és vissza irányú átmenetek átmeneti valószínűségeinek aránya éppen (2.62) egyenlet szerinti.

A fenti algoritmusok dinamikai tulajdonságai nagyban különböznek, ahogy korábban már említettem. Három különböző algoritmus dinamikai exponensének összehasonlítása látható a 2.2 táblázatban. A kétdimenziós Ising-modell szimulációjánál egy

d dimenzió	Metropolis	Swendsen-Wang	Wolff
2	2.167 ± 0.001	0.25 ± 0.01	0.25 ± 0.01
3	2.02 ± 0.02	0.54 ± 0.01	0.33 ± 0.02
4	—	0.86 ± 0.01	0.25 ± 0.02

2.2 táblázat: Monte Carlo-algoritmusok z dinamikai exponensei különböző dimenziókban [5].

100×100 -as négyzetrácson a kritikus hőmérsékleten a Metropolis-algoritmusnál kb. három nagyságrenddel hosszabb a korrelációs idő, mint a Wolff-algoritmus esetén, továbbá figyelembe véve a táblázatbeli adatokat is, t.i. hogy a minta méretével az utóbbi esetben a korrelációs idő alig változik, nyilvánvaló, hogy a kritikus viselkedés tanulmányozására a klaszterflip algoritmusok sokkal inkább alkalmasak, mint a klasszikus

algoritmusok.

3. fejezet

Véletlen kötésű Ising-rendszerek vizsgálata

3.1 Bevezetés

Már a kétdimenziós Ising-modell kritikus viselkedésének Onsager-féle [70] analitikus megoldása óta kérdés, hogy megváltoznak-e egy rendszer kritikus pontbeli tulajdonságai, ha „hibákat” teszünk a rendszerbe. A standard válasz a Harris-kritérium alapján sem adható meg, hiszen a fajhő kritikus exponense: $\alpha_{2D, Ising} = 0$ a kritérium marginális esete, így további vizsgálódás szükséges.

A továbbiakban a hígított Ising-modellen korábban elvégzett térelméleti vizsgálatok eredményeit és a Monte Carlo-vizsgálatokat tekintem át, majd a területen elért saját Monte Carlo-eredményeimet közlöm.

3.2 Előzmények

A kötés hígított Ising-modell Hamilton-operátora a következőképpen írható:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} s_i s_j, \quad (3.1)$$

ahol J_{ij} -k független valószínűségi változók, amelyek legegyszerűbb esetben két értéket J -t és J' -t vehetnek fel p és $(1 - p)$ valószínűséggel. A csatolások arányára az $r = J'/J$ jelölést használok a későbbiekben.

Ennek a rendszernek a kritikus viselkedésére a különböző elméleti megközelítések más-más eredményeket jósoltak. A ma legelterjedtebben elfogadott elmélet a Vik. S.

Dotsenko és V. S. Dotsenko [14] által a '80-as évek elején kidolgozottakon alapszik. A tiszta rendszer — $J_{ij} = \text{const.}$ — esetén a nem kölcsönható rendszerek kvantum térelméleti vizsgálatában fellépő m_0 fermion tömeg — ami a korrelációs hosszal fordítottan arányos — eltűnik. Ha véletlen kötések tesznek a spinek közé, akkor a leírásban a fermionok szabadok maradnak, de inhomogén térben mozognak. Hogy a homogenitás visszaálljon DD a replika trükköt alkalmazta, kölcsönhatásokat bevezetve a fermionok között. A kölcsönhatás g erőssége kicsi, ha a rendszer gyengén hígított. A kis kölcsönhatás esetén a renormált fermion tömeg:

$$m_R = \frac{m_0}{(1 + g \ln(\frac{1}{t}))^{1/2}}, \quad (3.2)$$

szerint változik, ahol $m_0 \sim t$ a tiszta rendszer fermion tömege és $t = |T_c - T|/T_c$ a redukált hőmérséklet. A renormált fermion tömeg definiálja a korrelációs hosszt:

$$\xi \sim \frac{1}{m_R} \sim \frac{(1 + g \ln(\frac{1}{t}))^{1/2}}{t} \quad (3.3)$$

és minden termodinamikai mennyiséget. A fenti egyenletből látható, hogy létezik egy t_{cr} crossover hőmérséklet

$$t_{cr} = e^{-1/g}, \quad (3.4)$$

amelynél nagyobb redukált hőmérsékletekre a logaritmikus tag nem játszik jelentős szerepet, így azokra a hígított rendszer viselkedése ugyanaz mint a tiszta rendszeré. A hígított rendszerre jellemző viselkedés csak a kritikushoz nagyon közeli hőmérsékleteken $t \ll t_{cr}$ észlelhető. Ez a crossover jelenség a véges méret effektusokat is befolyásolja, hiszen a t_{cr} hőmérsékletnek megfelelő l_{cr} crossover hosszánál kisebb L lineáris rendszerméreten a hígítás hatása nem lesz látható. Ez különösen fontos a számítógépes szimulációnál, ahol mindig véges méretekről van szó.

A DD-elmélet szerint a hígított rendszer fajhője dupla logaritmikus szinguláris viselkedést mutat

$$C(t) \sim \ln \left(1 + g \ln \left(\frac{1}{t} \right) \right) \quad (3.5)$$

a tiszta esetre érvényes $C(t) \sim \ln(1/t)$ egyszerű viselkedés helyett. A $\Gamma(r)$ spin-spin korrelációs függvény a tiszta Ising-modell $\Gamma(r) \sim 1/r^{1/4}$ ($r \ll l_{cr}$ esetben) függésről — nagyobb távolságokban $r \gg l_{cr}$ — exponenciálissá változik. Ha $\Gamma(r)$ ismert, akkor $\chi(t)$

mágneses szuszceptibilitás és $M(t)$ mágnesezettség már könnyen számolható. A DD-elmélet azt jósolta, hogy a β exponens zérusra csökken és a szuszceptibilitás kritikus exponense $\gamma = 2$ -re változik.

A DD-elméletet több oldalról támadták. Ziegler [107] szerint a fajhő minden hőmérsékleten véges, tehát még a nagyon „lassú” dupla logaritmikus szingularitást sem mutatja, míg Shalaev [81], Shankar [82] és Ludwig [64] eredményei ellentmondtak a DD elmélet jóslatainak a mágneses mennyiségekre: $\Gamma(r)$ -re, M -re és χ -re, de a fajhőre ugyanazt az eredményt kapták.

Shalaev, Shankar és Ludwig a hígított esetben a $\Gamma(r)$ korrelációs függvény $r \rightarrow \infty$ aszimptotikus viselkedésére ugyanazt az $\eta = 1/4$ exponenst kapták mint a tiszta eset exponense. Shalaev — felhasználva a DD-elméletben megkapott m_R renormált tömeget — meghatározta a mágnesezettség és a szuszceptibilitás aszimptotikus t -függését is:

$$M(t) \sim \frac{t^{1/8}}{\left(1 + g \ln \left(\frac{1}{t}\right)\right)^{1/16}} \quad (3.6)$$

$$\chi(t) \sim t^{-7/4} \left(1 + g \ln \left(\frac{1}{t}\right)\right)^{1/8}. \quad (3.7)$$

Láthatók a tiszta rendszer $\beta = 1/8$ és $\gamma = 7/4$ kritikus exponensei és a szennyeződés miatt bejövő logaritmikus korrekciók.

A fajhő véges méret függése a kritikus pontban 3.5 alapján

$$C(L) = C_0 + C_1 \ln(1 + u \ln L) \quad (3.8)$$

alakú, ahol $u = 1/\ln l_{cr}$. A $M(L)$ mágnesezettség és a $\chi(L)$ szuszceptibilitás különböző alakú a két elméletben.

A korai véletlen kötésű Ising-modell Monte Carlo-vizsgálatok [108] a $r = 0$ és $p = 1, 0.9, 0.8, 0.7, 0.6$ esetekre vonatkoztak és a T_c kritikus hőmérséklet hígítástól való függésének egzakt aszimptotikus viselkedését [90] $p < 1$ -re jól visszaadták. A fázisátmenet minden vizsgált p értékre éles maradt és a γ kritikus exponenst látszólag nem befolyásolta a hígítás. A hígítás meghatározta tartományba való crossover, amelyet a logaritmikus korrekciók jellemeznek, nem volt felismerhető a viszonylag kis rendszerméreteket ($L \leq 60$) és a vizsgálatok korlátozott statisztikai pontossága miatt az egy-spinflip algoritmusokkal.

A fent említett — egymásnak ellentmondó — analitikus eredmények vizsgálatát a '80-as évek második felében felfedezett — a T_c közelében a hagyományosnál sokkal

gyorsabb — klaszterflip algoritmusok és a számítógép kapacitások növekedése tette lehetővé [2][97][93][92][85]. A vizsgálatokat $L \times L$ -es négyzetrácsokon végezték helikális és teljesen periodikus határfeltételek mellett. A J és J' csatolási állandók egyenlő valószínűséggel voltak jelen a rendszerben: $p = \frac{1}{2}$. Ebben az esetben a modell önduális és így a kritikus hőmérséklet egzaktul meghatározható:

$$\tanh(J/T_c) = e^{-2J'/T_c} \quad (3.9)$$

és — az ettől eltérő p értékek esetében a T_c -ben fellépő pontatlanság — nem okoz ilyenkor további pontatlanságokat a kritikus exponensek meghatározásában. A hígítás hatását különböző csatolási állandó arányok mellett vizsgálták ($r = J'/J = 1, 1/2, 3/10, 1/4, 1/10$) [97], aminek során a crossover szisztematikusan tanulmányozható volt.

A Swendsen-Wang és a Wolff-féle klaszterflip algoritmusokat alkalmazták, kihasználva, hogy ezek különösen jók a véletlen Ising-modell számolásokban, lévén a leghatékonyabbak a perkolációs határesetben [97][98].

A kritikus pontban az l_{cr} crossoverhossz erősen függ a csatolások arányától $r = J'/J$ -tól hiszen $r = 1/10$ esetén $l_{cr} \approx 2$, míg ha $r = 1/2$, akkor $l_{cr} \approx 10^3$. A vizsgálatokat általában $r = 1/4$ -nél végezték, ahol $l_{cr} \approx 16$. Ebben az esetben a fajhő véges méret függésére $C(L)$ megkapták a DD által adott (3.8)-beli dupla logaritmikus viselkedést. Az $M(L)$ ($\sim L^{-x}$)-re és $\chi(L)$ ($\sim L^y$)-ra a véges méret skálázásból kapott adatok szerint $x \approx 0.1245$ és $y \approx 1.7507$, nagyon jó egyezéssel a tiszta eset β és γ exponenseivel, ami a Shalaev-Shankar-Ludwig elmélet eredményeit támasztja alá. A kritikus korreláció $\Gamma(r)$ vizsgálata azt mutatta, hogy kis távolságokon a tiszta rendszer korrelációs függvényéhez képest 10^{-3} a relatív eltérés, míg nagyobb távolságokon (de $q < \frac{L}{2}$, $L \leq 1024$) néhány százalék, ami nem egy triviális eredmény, hiszen a kritikus hőmérséklet kb. fele a tiszta rendszerének. Azonban minél nagyobb a rendszer, annál kisebb az eltérés egy fix q távolság esetében. Ez szintén támogatja Shalaev [81] és Ludwig [64] elméletét.

A fajhő, a mágnesezettség és a szuszceptibilitás hőmérsékletfüggésére kapott eredmények is alátámasztják a fenti konklúziót.

A $C(t)$ a dupla logaritmikus viselkedést mutatja. Az adott hőmérsékleteken számolt effektív kritikus exponensek

$$\beta_{eff} = \frac{\partial M(t)}{\partial \ln t}; \quad \gamma_{eff} = \frac{\partial \chi(t)}{\partial \ln t} \quad (3.10)$$

mutatják a tiszta hatvány függvény szerinti viselkedés mellett a logaritmikus korrekciót is, ami az effektív exponensek nem-monoton viselkedéséhez vezet. Az így kapott

„túllövés” (overshooting) jelenségét egy későbbi ábrán mutatom meg, amire a következő görbe jól illeszthető:

$$M(t) \approx M_0 t^{1/8} (1 + s_1 t) \left(1 + g \ln \left(\frac{1}{t} \right) \right)^{-1/16} \quad (3.11)$$

figyelembe véve a skálázáshoz adódó első korrekciós tagot $(1 + s_1 t)$ -t is, ami T_c -től távolabb módosítja a görbe alakját, illetve a — logaritmikus — crossover létrehozó tagot. Hasonló érvényes a szuszceptibilitásra is.

A mágnesezettségre és a szuszceptibilitásra kapott adatokat úgy is magyarázhatnánk, hogy a kritikus exponensek növekedtek a tiszta esethez képest [48][49], vagy a Shalaev-Shankar-Ludwig-elmélettel konzisztensen: nem változtak, csak erős logaritmikus korrekció van. Figyelembe véve, hogy a fajhő exponense nem változik, α zérus marad, a kritikus exponensek az első esetben nem elégítenék ki az $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$ Rushbrook skálatörvényt, hiszen a β és γ is látszólag megnő.

A következőkben vizsgáljuk meg a két oldalán szabad határfeltételű véletlen kötésű Ising-modell kritikus tulajdonságait.

3.3 Kétdimenziós hígított Ising-modell

A két oldalán szabad határfeltételű véletlen kötésű Ising-modellben egyszerre tanulmányozható a hígítás hatása a felület és a tömb kritikus viselkedésére.

Hasonlóan az előzőekhez kétféle csatolási állandóval hathatnak kölcsön a rácsbeli legközelebbi szomszéd spinek. A (3.1) Hamilton-operátor írja le a rendszer energiáját. Mindkét csatolási állandó egyenlő $p = 1/2$ valószínűséggel fordul elő. A hígítást a két csatolási állandó arányának $r = J'/J$ változtatásával érjük el. A rendszer vizsgálatát (11) és (10) párhuzamos szabad felületek mellett végeztem. A felületen és minden vele párhuzamos K oszlopban L spin van. Az első és az utolsó sorok periodikus határfeltétellel kapcsolódnak egymáshoz. A továbbiakban az i index jelöli, hogy mely oszlopról van szó $i = 1, 2, \dots, K$ és a j index az adott oszlopon belüli pozíciót jelöli $j = 1, 2, \dots, L$. Az $i = 1$ és $i = K$ a rendszer két szabad felületét jelöli. A legtöbb számolás az (11) felülettel rendelkező modellre történt, ami lehetőséget adott a csillag-delta módszerrel [27] kapott eredményekkel történő összehasonlításra [35][54]. A rendszerek mérete $K = 40$ és 1280 között volt, hogy a véges méret effektusok jól követhetők legyenek.

A vizsgálatok a Wolff-féle [104] egy-klaszterflip Monte Carlo-algoritmussal folytak

és kisebb rendszerek és T_c -től távolabbi hőmérsékletek esetében főként tesztelés céljából összehasonlítást végeztem a Metropolis-algoritmussal [68].

A vizsgált mennyiség a mágnesezettségi profil:

$$m_i = \frac{1}{L} \langle \left| \sum_{j=1}^L s_{i,j} \right| \rangle, \quad (3.12)$$

ahol $s_{i,j}$ az i -edik oszlop j -edik sorában elhelyezkedő spin. Az abszolútérték szokásosan a T_c alatt a szimulációban a nem-eltűnő mágnesezettség elérése végett van. A felületi mágnesezettség $m_s = m_1 = m_K$.

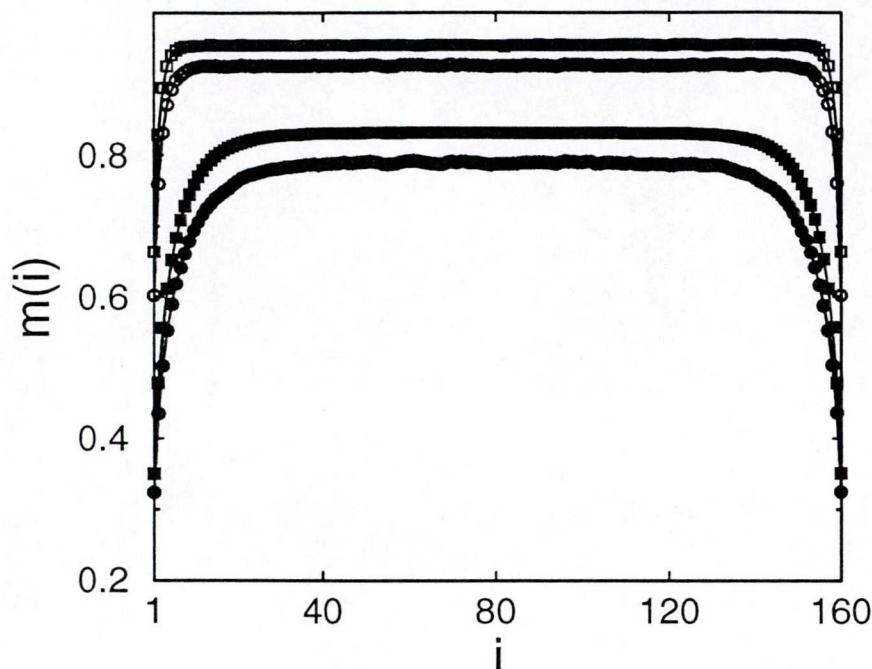
A Wolff-algoritmus rendkívül gyorsan az első néhány klaszterflip után már túljut a kezdeti termalizációs tartományon. Ehhez képest nagyon óvatosan, általában az első néhány 10^3 klaszterfliptől tekintettünk el. Az időbeli korreláció az egymás után következő állapotok között nagyon kicsi, néhány klaszterflip. Az átlagolást általában (rendszermérettől függően) néhány 10^4 klaszterflipre végeztük, hogy kellő pontosságot érjünk el m_i -kben. Ezen m_i -k szórása elhanyagolható volt a kötéskonfigurációkra történő átlagolás (quenched average) szórásához képest.

A véletlenszámgenerátoroktól [12][51] esetleg eredő hiba [83][84] miatt többfélét is kipróbáltunk, de lényeges különbség nem adódott. A kötéskonfiguráció kiosztására az R250 nevű „shift register” [50] módszert használtuk a kis korrelációi miatt. A Monte Carlo véletlenszámokat a lineáris kongruencia algoritmussal [57] állítottuk elő, amelyben erősebb az egymás után következő véletlenszámok közötti korreláció, és ugyan a Wolff-algoritmusban ezeket a véletlenszámokat egy adott —már klaszterbeli— spin körüli ugyanolyan állású spinek klaszterhez csatolásának eldöntéséhez használjuk, és az adott spin a már kialakuló klaszter peremének egymástól viszonylag távoli helyein is lehet, és ha sok azonos állású spin van a rendszerben, akkor a véletlenszámokat generáló algoritmus korrelációs idejétől függően a kialakuló klaszter bizonyos részei gyorsan megnőnek, míg más helyein kevés perkolációs kötés alakul ki, viszont az algoritmus minden Monte Carlo-lépésében térben véletlenszerűen kiválasztott kezdőspin megfelelően összekeveri a rács különböző tartományainak újabb klaszterekhez való kapcsolódásának valószínűségét, így ez a korreláció végül nem okoz problémát.

3.3.1 Tömbi fázisátalakulás

A 3.1 ábrán látható mágnesezettségi profilokon jól észrevehető, hogy megfelelően nagy rendszerméretek esetén széles plató alakul ki a felületektől távol, ami jól megfelel a tömbi mágnesezettségnek. A felületek felé a mágnesezettség monoton csökken a felü-





3.1 ábra: A kétdimenziós (11) felületű Ising-modell $m(i)$ mágnesezettségi profilja a tiszta esetben (négyzetek) és az $r = 1/4$ hígított esetben (körök), a $t = 0.2$ (üres szimbólumok) és a $t = 0.05$ (teli szimbólumok) hőmérsékleteken, 160×80 -as rendszerméretnél.

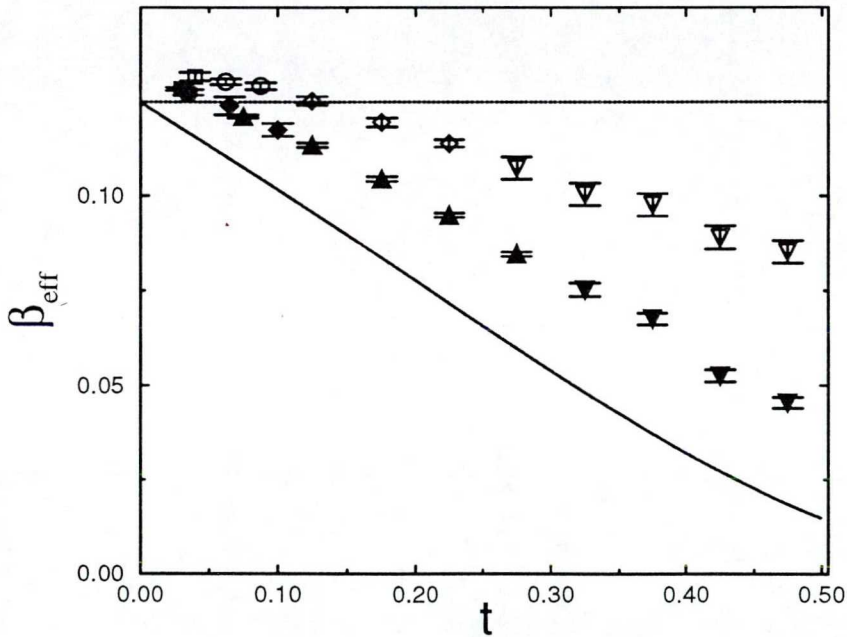
leten levő spinek kisebb koordinációs száma miatt ((11) felületen $z = 2$, (10) felületnél $z = 3$). A profilok az $r = 1$ tiszta esetre és egy hígított $r = 1/4$, azonos t redukált hőmérsékletek mellett (11) felület esetén készültek. A hígítás láthatóan csökkenti a mágnesezettséget fix t mellett. Az ábráról kvalitatíve az is leolvasható, hogy az egyszerű elképzelésekkel ellentétben a bulk korrelációs hossz nő a hígítással, hiszen a platót a felülettől távolabb éri el a mágnesezettség a hígított esetben.

A tömbi mágnesezettség kritikus hőmérséklethez közeli viselkedése a homogén esetben ismert [70]. Az $r = 1/4$ hígított rendszerre vonatkozó korábbi Monte Carlo vizsgálatok [85] a (3.11) Shalaev-megoldásnak megfelelő értékeket adtak, amit mi is — a felületi exponensek számolásának egyik mellékeredményeként — a görbére illeszkedőnek kaptunk. Erősebb hígítás esetén — $r = 1/10$ — az irodalomban még nem közölt adatokat kaptunk. Az $r = 1/4$ -nél látható "túllövés" tovább nő $r = 1/10$ -ben, ami még erősebb logaritmikus korrekciót jelez (3.2 ábra). Megjegyzendő, hogy az áb-

rázolt β_b exponensek a

$$\beta_b^{eff}(t) = \frac{d \ln m_b(t)}{d \ln t} \approx \frac{\ln \frac{m_b(t+\Delta t)}{m_b(t-\Delta t)}}{\ln \frac{t+\Delta t}{t-\Delta t}} \quad (3.13)$$

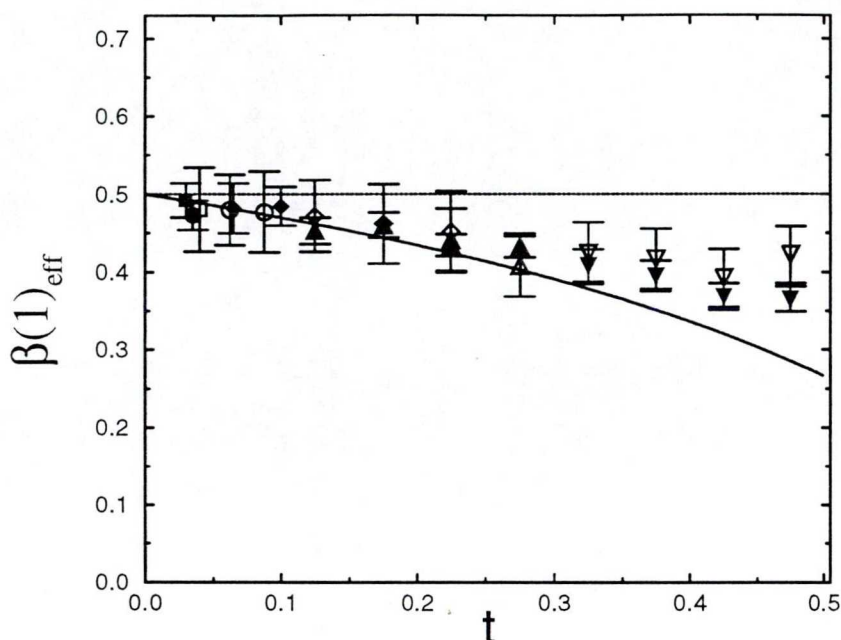
alapján voltak számolva, ahol az m_b -ket a felülettől távol — a korrelációs hosszak megfelelő — távoli tömbi m_i -k átlagai adták és a β_b^{eff} -eket adott t -re csak két különböző hőmérsékleten felvett m_b -kből számoltuk. (A korábbi vizsgálatokban [85] az effektív exponenseket jóval több pontból számolták, hogy megfelelő eredményeket kapjanak.) Ennek ellenére látható a szimuláció nagy pontossága [86].



3.2 ábra: A tömbi mágnesezettség effektív exponensei $r = 1$ tiszta rendszer esetén (folytonos vonal, egzakt eredmény), $r = 1/4$ esetén (teli szimbólumok) és $r = 1/10$ esetén (üres szimbólumok). A szaggatott vonal a tiszta rendszer aszimptotikus értékét jelzi. Különböző hőmérsékleteken 80×40 (fordított háromszög), 160×80 (háromszög), 320×160 (hegyére állított négyszög), 640×320 (kör) és 1280×640 (négyszög) méretű rendszereket vizsgáltuk. A hibahatárok a különböző kötéskiosztású rendszereken vett átlagok szórásából származnak.

3.3.2 Felületi fázisátalakulás

A felületi exponens vizsgálatánál a tömbi széles platónak köszönhetően mindkét felü-

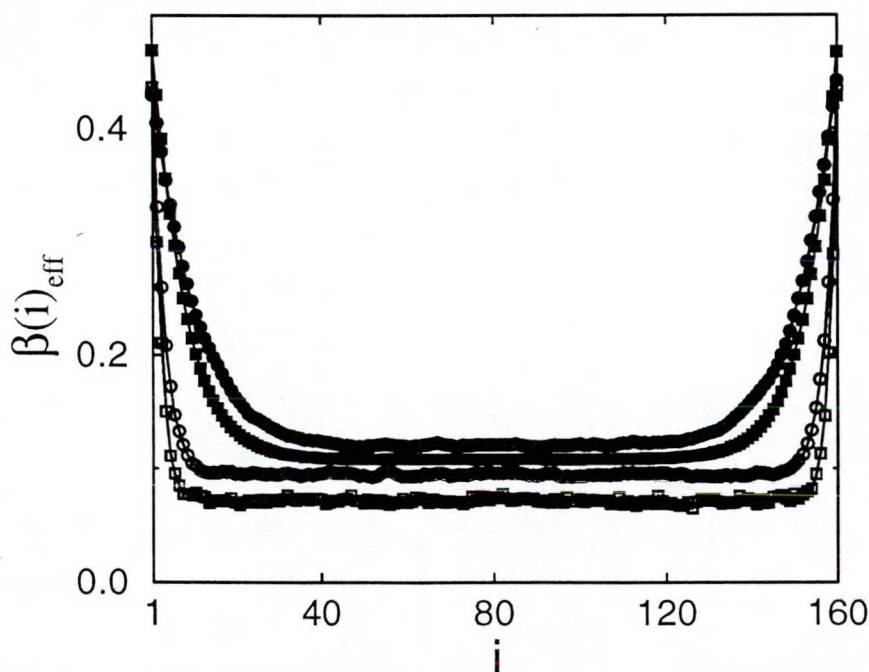


3.3 ábra: A felületi mágnesezettség effektív exponensei $r = 1$ tiszta rendszer esetén (folytonos vonal, egzakt eredmény), $r = 1/4$ esetén (teli szimbólumok) és $r = 1/10$ esetén (üres szimbólumok). A szaggatott vonal a tiszta rendszer aszimptotikus értékét jelzi. 80×40 (fordított háromszög), 160×80 (háromszög), 320×160 (hegyére állított négyszög), 640×320 (kör) és 1280×640 (négyszög) méretű rendszereket vizsgáltunk. A hibahatárok a különböző kötéskiosztású rendszereken vett átlagok szórásából származnak.

let egy félvégtelen rendszer felületének tekinthető, így az eredmények összehasonlíthatók voltak a tiszta rendszerre ismert analitikus eredményekkel [4][72], és a Monte Carlo-szimulációval párhuzamosan a csillag-delta transzformáció hígított rendszerre általánosított változatával végzett vizsgálatokkal [35][54]. A kétféle módszerrel való vizsgálat célja az volt, hogy kiderítsük a felületi exponensek hígítás hatására történő esetleges megváltozását, más univerzalitási osztályba tartozását. A (3.13) egyenlethez hasonló módon Monte Carlo-szimulációval számolt felületi mágnesezettségi effektív exponenseket a 3.3 ábrán láthatjuk. A tiszta rendszerre jól visszakaptuk a Peschel-féle [72] effektív exponens változást és aszimptotikus viselkedést. A hígítás hatására a β_s exponens kis mértékben megváltozni látszik; a változás kb. ugyanakkora — 5 százalék

— mint a β_b megváltozása, csak ellentétes előjelű, és a hígítással ez esetben is növekszik [35][86]. A kis változás miatt nehéz eldönteni, hogy az exponens valóban — a hibahatárokat is figyelembe véve — eltér a tiszta rendszer $\beta_s = 1/2$ exponensétől, vagy itt is erős logaritmikus korrekciókkal van dolgunk. Az effektív exponensek hibahatárait meglehetősen konzervatív módon számoltuk: a két — $t + \Delta t$ és $t - \Delta t$ — hőmérsékleten kapott felületi mágnesezettségek hibájából a szokásos Gauss-féle hibaterjedési képlettel. Ennél határozottan kisebb hibát kapunk, ha minden esetben két komplementer kötéskiosztáshoz tartozó mágnesezettségek számtani közepe átlagának hibáját vesszük alapul. Az ehhez tartozó hiba kb. az ábrán jelölt szimbólumok méretével egyezik meg.

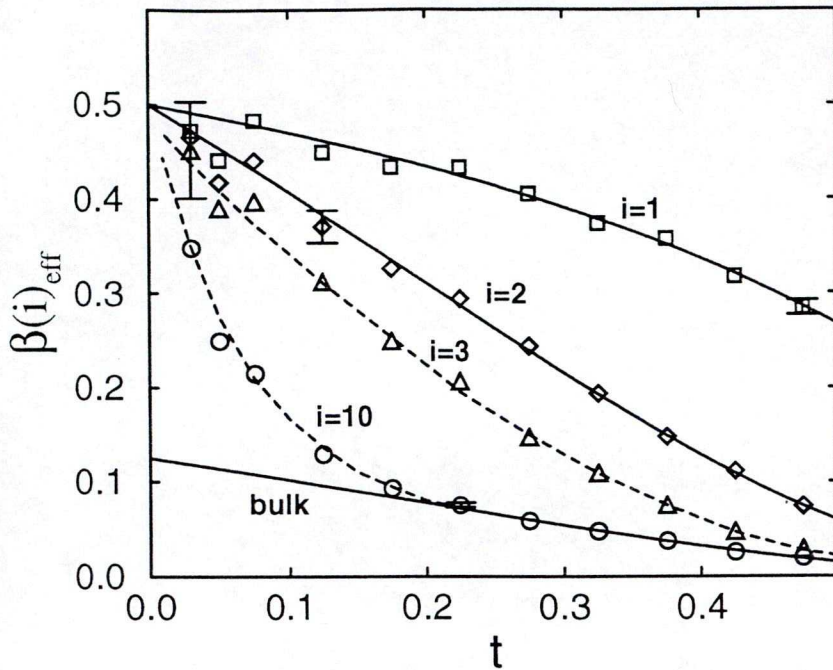
A 3.4 ábrán a teljes β_i^{eff} profilokat láthatjuk a tiszta és egy hígított rendszer esetén különböző kis redukált hőmérsékletek mellett. Látható a tömbi exponensek növeke-



3.4 ábra: A kétdimenziós (11) felületű Ising-modell $\beta(i)$ mágnesezettségi exponens profilja a tiszta esetben (négyzetek) és az $r = 1/4$ hígított esetben (körök), a $t = 0.175$ (üres szimbólumok) és a $t = 0.075$ (teli szimbólumok) hőmérsékleteken, 160×80 -as rendszerméretnél.

dése a hígítás hatására és a felületi exponensek csökkenése.

Az 3.5 ábra a különböző β_i^{eff} -ek aszimptotikus viselkedését mutatja be a felülethez közeli rétegekre és a rendszerben mélyebben is. Az $i = 10$ esetén jól látható a crossover a tömb effektív exponensről a felület meghatározta viselkedésig, ahol a felülettől



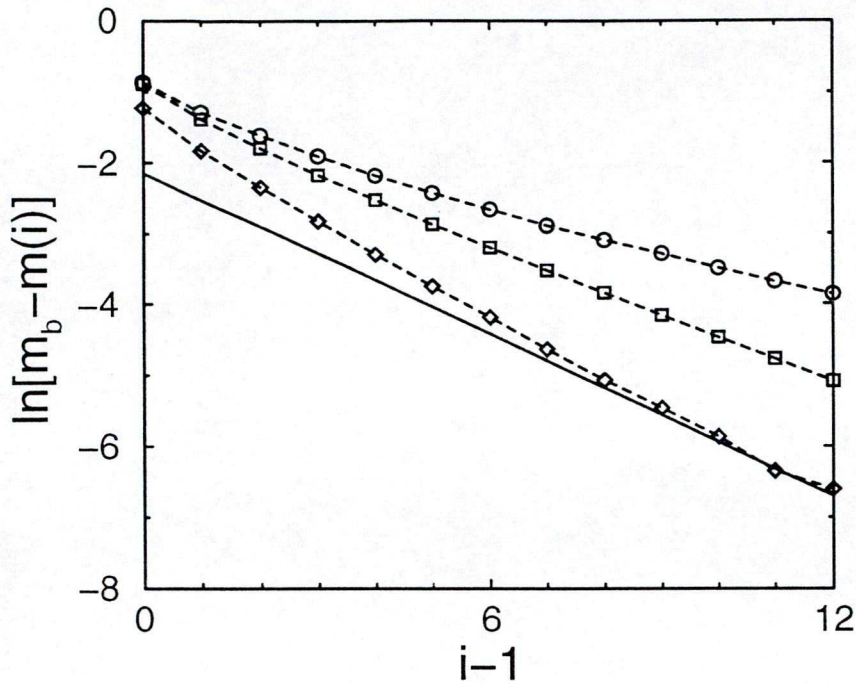
3.5 ábra: Az effektív exponensek hőmérsékletfüggése a felülethez közeli $i = 1, 2, 3, 10$ -ik rétegben és a minta belsejében (bulk). A folytonos vonalak egzakt eredmények [71][72][70], míg a szaggatott vonalak a szimulációs eredményeket követik, jelezve, hogy milyen hőmérsékleten játszódik le egy „crossover” a tömbi exponensről a felületre.

való távolság már kisebb, mint az adott hőmérséklethez tartozó korrelációs hossz. Általánosan is igaz, hogy tetszőleges, de véges távolságban a felülettől a β_i^{eff} a felületi exponenshez tart, ahogy T_c -t közelítjük. Hasonló jelenséget figyeltek meg a háromdimenziós Ising-modell esetében is [75].

A korrelációs hossz viselkedése is megállapítható volt feltéve, hogy a felület és a tömb között a mágnesezettségi profil a tiszta esethez — a Bariev [4] által megmutatotthoz — hasonlóan jellemezhető, azaz három rész különböztethető meg: a felülethez legközelebb levő réteg, ahol hatványfüggvényyszerű a viselkedés, egy bonyolultabban leírható köztes réteg, és egy olyan réteg, amelyben a mágnesezettség exponenciálisan tart az m_b -hez:

$$m_b - m_i \sim e^{-\frac{i}{\xi_b}}. \quad (3.14)$$

Ennek segítségével ξ_b meghatározható a 3.6 ábrán látható görbék bulkhoz közeli részei érintőjének tangensével. A $t = 0.1$ hőmérsékleten az (10) felület esetében $\xi_b = 2.14$ —



3.6 ábra: A mágnesezettség felülethez közeli viselkedése, amelyből látható, hogy a tömbi mágnesezettséget a rendszerek exponenciálisan érik el [4]. A $t = 0.1$ hőmérsékleten az ábráról az (10) felületű tiszta rendszer (élére állított négyszög), (11) felületű tiszta rendszer (négyszög) és az $r = 1/4$ hígítású rendszer (kör) korrelációs hossza becsülhető meg. A folytonos vonal az ezen a hőmérsékleten egzaktul meghatározható [4] korrelációs hosszak felel meg.

megegyezik a Bariev-értékkel — adódott, az (11) felület $r = 1$ esetén $\xi_b = 2.29$ és az (11) felület és $r = 1/4$ hígítás esetén $\xi_b = 3.6$ (egységnek véve a rácscsillandót). A hígítással tehát növekszik a korrelációs hossz, és $\xi_b \sim t^{-\nu}$, $\nu = 1$ hőmérsékletfüggést feltételezve látható, hogy a vizsgált rendszerek megfelelően nagyok ahhoz, hogy a véges méret effektusok nagyrészt kizárhatóak legyenek (az összes említett vizsgálatban).

4. fejezet

Hierarchikus kölcsönhatású modellek

4.1 Bevezetés

Az 1. fejezetben említett aperiodikus struktúrák egy fajtája a hierarchikus rendszer, amelyet számos különböző kontextusban vizsgáltak korábban. Ilyen jellegű struktúrát figyeltek meg például rendezetlen rendszerek (spinüvegek) [69], illetve proteinek [3] relaxációs folyamataiban vagy nagy földrengések előtti geológiai folyamatokban [30], számítógép architektúrákban [31], gazdasági szerveződésekben [87], de tőzsdei árfolyamváltozásokban [15] is. Hierarchikus „potenciálban” történő diffúzió anomális jelleget mutatott, amelyet ultradiffúciónak neveznek [32][94][65]¹.

Ebben a fejezetben ilyen hierarchikus struktúrájú spinrendszerekbeli fázisátalakulásokat vizsgállok. A második alfejezetben a hierarchikusan réteges klasszikus kétdimenziós Ising-modell illetve ennek az extrém anizotróp határesetben megfelelő kvantum Ising-lánc felületi fázisátalakulását vizsgálom analitikus eszközökkel. A hierarchikus sorozat vándorlási exponense $\omega = 0$, a tiszta rendszer korrelációs hossz exponense $\nu = 1$, így a Luck-kritérium szerint a (2.16)-beli ϕ crossover exponens zérus értéke miatt a perturbáció marginális, így ennek a fázisátalakulásra való hatásának megállapítása részletes vizsgálatokat tesz szükségessé.²

A harmadik alfejezetben a kétdimenziós hierarchikusan réteges Ising-modell két távoli párhuzamos felületen levő spinjeit ellentétes állapotban rögzítve vizsgálom a fázisokat elválasztó határfelület fluktuációs tulajdonságait. Ebben az esetben a rétegekre merőleges korrelációs hossz exponens $\nu_{\perp} = 1/2$, így a crossover exponens pozitív, tehát a perturbáció releváns, és a határfelületi fluktuációs exponens (nemfolytonos) megvál-

¹A témáról összefoglaló található [20]-ban

²Ebben a rendszerben más aperiodicitásra hasonló marginális viselkedést tapasztaltak: pl. [7]

tozása várható.

A negyedik alfejezet a fenti két rendszer együttes tárgyalását tartalmazza a renormálási csoport transzformáció keretein belül.

4.2 Felületi mágnesezettség

A kétdimenziós Ising-modell (10) felületi fázisátalakulását vizsgálom a következőkben. A felülettel párhuzamos rétegekben a kölcsönhatás konstans K_1 , míg a rétegek közötti kölcsönhatás a felületre merőleges irányban hierarchikusan változik: $K_2(k)$ a k és $k+1$ rétegek között. Az extrém anizotróp határesetben $K_1 \rightarrow \infty$, $K_2(k) \rightarrow 0$ a probléma transzfermátrixa a kvantum Ising-lánc (2.34) Hamilton-operátorát tartalmazza:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_k [\sigma_k^z + \lambda_k \sigma_k^x \sigma_{k+1}^x], \quad (4.1)$$

ahol σ_k^x, σ_k^z a Pauli-mátrixok k helyen és $\lambda_k = -2K_2(k)/\ln(\tanh K_1)$.

A λ_k sorozat a következőképpen áll elő

$$\lambda_k = \lambda r^{f_k}, \quad (4.2)$$

ahol r az ún. hierarchikus paraméter, λ egy referencia érték és f_k -k természetes számok, amelyek a következőképpen adhatók meg:

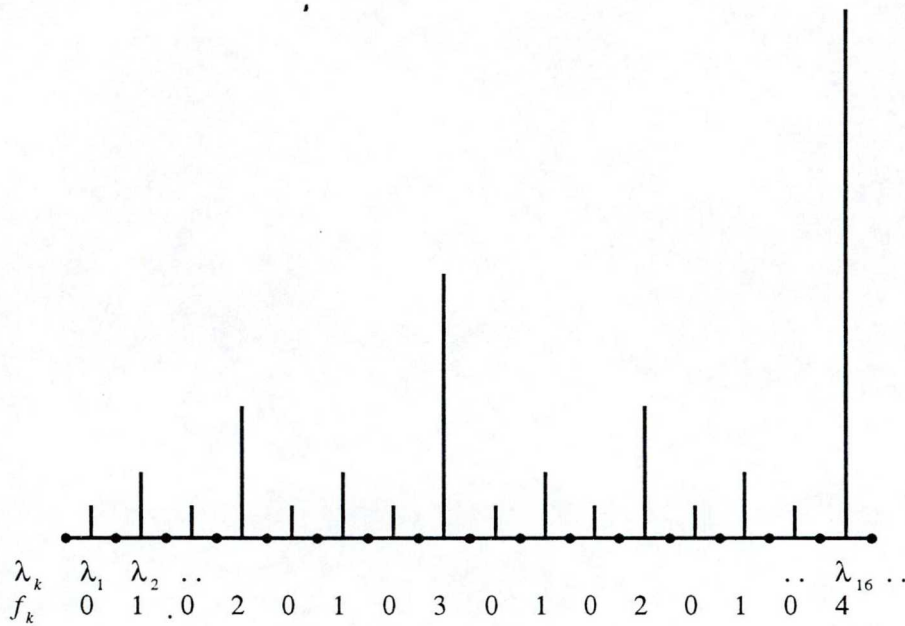
$$k = m^{f_k}(ml + \mu), \quad l = 0, 1, \dots, \quad \mu = 1, 2, \dots, m-1, \quad (4.3)$$

ahol m egész szám és a sorozat "periodicitását" határozza meg. A sorozat általánosítható úgy, hogy (4.2) egyenletben $\lambda_k = \lambda r^{g(f_k)}$, ahol $g(x)$ egy analitikus függvény. A hatványfüggvényekre általánosított változatot fogom vizsgálni: $g(x) = x^\omega$, $\omega > 0$, így az eredeti sorozat $\omega = 1$ -hez tartozik.

A kétdimenziós Ising-modell felületi mágnesezettsége az extrém anizotróp határesetben a 2.41 alapján következő:

$$m_s = \left(1 + \sum_{j=1}^{\infty} \prod_{k=1}^j \lambda_k^{-2} \right)^{-1/2}. \quad (4.4)$$

Az általánosított hierarchikus sorozatra, amely az ω exponenst is tartalmazza a felületi



4.1 ábra: Hierarchikus rács kötéseiosztása. Az oszlopok magasságai a csatolási állandók erősségével arányosak. Az f_k -k értékei a hierarchia szintjét jelölik. $m = 2, \nu > 1$

mágnesezettség a következőképpen írható át:

$$m_s = [S(\lambda, r)]^{-1/2}, \quad (4.5)$$

$$S(\lambda, r) = \sum_{j=0}^{\infty} \lambda^{-2j} r^{-2n_j}, \quad (4.6)$$

$$n_j = \sum_{k=1}^j (f_k)^\omega, \quad n_0 = 0. \quad (4.7)$$

A kritikus csatolást (2.40) egyenlet alapján az alábbi feltételből kapjuk:

$$\lim_{j \rightarrow \infty} \prod_{k=1}^j \lambda_k = 1, \quad (4.8)$$

amiből látható, hogy a $\lambda = \lambda_c$ kritikus csatolás a hierarchikus paramétertől függ:

$$\lambda_c = r^{-\delta(\omega, m)}, \quad (4.9)$$

ahol $\delta(\omega, m) = \lim_{j \rightarrow \infty} n_{mj} / m^j$. A $\delta(\omega, m)$ a Függelékben részletezett számítások után:

$$\delta(\omega, m) = \left(1 - \frac{1}{m}\right) \sum_{j=1}^{\infty} \frac{j^\omega}{m^j} \quad (4.10)$$

alakba írható és egész ω -kra zárt alakban is kifejezhető. $\omega = 1, 2, 3$ és 4 esetében:

$$\delta(1, m) = \frac{1}{m-1} \quad (4.11)$$

$$\delta(2, m) = \frac{m+1}{(m-1)^2} \quad (4.12)$$

$$\delta(3, m) = \frac{m^2 + 4m + 1}{(m-1)^3} \quad (4.13)$$

$$\delta(4, m) = \frac{m^3 + 11m^2 + 11m + 1}{(m-1)^4} \quad (4.14)$$

Az $\omega = 1$ esetet vizsgálom először. A (4.6) egyenletbeli hierarchikus paraméter exponenciájára az $f_{mp} = f_p + 1$ és $f_{mp+\mu} = 0, \mu = 1, 2, \dots, m-1$ segítségével a következő relációk írhatók fel: $n_{mp} = n_p + p$ és $n_{mp+\mu} = n_{mp}$. Így az (4.6) egyenletbeli $S(\lambda, r)$ összeget m részre bontva

$$S(\lambda, r) = \sum_{p=0}^{\infty} \lambda^{-2mp} r^{-2n_{mp}} + \sum_{\mu=1}^{m-1} \sum_{p=0}^{\infty} \lambda^{-2(mp+\mu)} r^{-2n_{mp+\mu}}, \quad (4.15)$$

és felhasználva az n_j -k közötti relációkat az alábbi egyenletet kapjuk:

$$S(\lambda, r) = S(\lambda^m r, r) \frac{1 - \lambda^{-2m}}{1 - \lambda^{-2}}. \quad (4.16)$$

Ebből a kifejezésből a β_s felületi mágnesezettségi exponens, amelyet $m_s(t) \sim t^{\beta_s}$ definiál, ahol $t = 1 - (\lambda_c/\lambda)^2 \rightarrow 0^+$ (a redukált hőmérséklet) a [95]-ben alkalmazottak szerint a következőképpen kapható. Jelölje $S(u)$ az $S(\lambda, r)$ -nek az $u = (\lambda_c/\lambda)^2$ szerinti sorfejtését. A (4.5) egyenlet szerint $S(u)$ -nak a következő hatványfüggvény szingularitást kell mutatnia

$$S(u) \sim (1 - u)^{-2\beta_s}. \quad (4.17)$$

A (4.16)-ban az új csatolás $\lambda' = \lambda^m r$ lesz, míg r és így λ_c is változatlan marad ($\lambda'_c = \lambda_c$). A (4.16) egyenletben $S(\lambda^m r, r)$ ugyanolyan szinguláris viselkedést kell hogy mutasson, mint $S(\lambda, r)$ —hiszen a (4.16)-ban az $S(\lambda^m r, r)$ szorzófaktor nem szinguláris—, ahogy

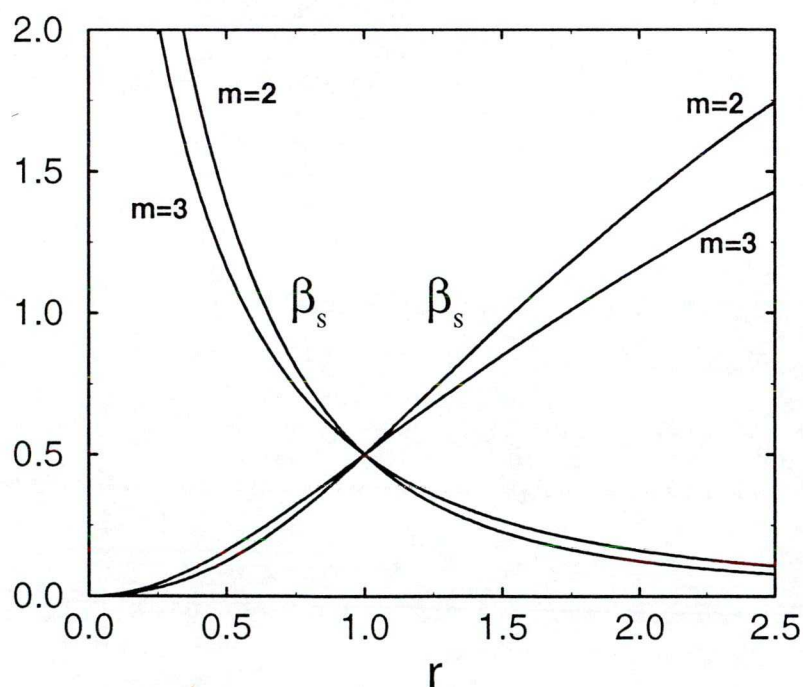
$\lambda \rightarrow \lambda_c$ egy $A(r)$ amplitudóval:

$$S(\lambda^m r, r) = A(r) \left[1 - \left(\frac{\lambda_c}{\lambda'} \right)^2 \right]^{-2\beta_s} = A(r) \left[1 - \left(\frac{\lambda_c}{\lambda} \right)^{2m} \right]^{-2\beta_s}, \quad (4.18)$$

ahol (4.9) és (4.11) egyenleteket használtuk. Ezt visszaírva (4.16) egyenletbe kapjuk az exponenst

$$\beta_s = \frac{\ln \left[\frac{1 - \lambda_c^{-2m}}{1 - \lambda_c^{-2}} \right]}{2 \ln m}.$$

Az $m = 2$ esetben visszakapjuk az ismert [60] eredményt. A fentiek szerint tehát az $\omega = 1$ esetben a hierarchikus Ising-modell kritikus viselkedése nem univerzális, r hierarchikus paraméterrel folytonosan változik. Ezt az eredményt láthatjuk a 4.2 ábrán különböző m periódus hosszakra.



4.2 ábra: A felületi mágnesezettség exponense az r hierarchikus paraméter függvényében a rendszer bal (β_s) és jobb ($\bar{\beta}_s$) felületén különböző m periodicitások esetén

A következőkben vizsgáljuk a rendszert hosszú, de véges szekvenciákon. A rend-

szer hossza legyen $j = m^N - 1 \equiv L - 1$ és így:

$$S_N(\lambda, r) = 1 + \sum_{j=1}^{m^N-1} \prod_{k=1}^j \lambda_k^{-2} = \sum_{j=0}^{m^N-1} \lambda^{-2j} r^{-2n_j}. \quad (4.19)$$

Ez a mennyiség rekurzív módon is előállítható

$$S_{N+1}(\lambda, r) = \frac{1 - X^{2m}}{1 - X^2} S_N(\lambda, r), \quad X = \lambda^{-L} r^{-n_L}. \quad (4.20)$$

A Függelékben megmutatottak szerint nagy L esetén a (4.9) kritikus feltétel véges méret korrekciói logaritmikusak

$$n_L = \delta(\omega, m)L - \frac{\omega}{m-1} N^{\omega-1} + \mathcal{O}(N^{\omega-2}), \quad (4.21)$$

így az X paraméter vezető rendben

$$X = (\lambda_c/\lambda)^L r^{[\omega/(m-1)]N^{\omega-1}}, \quad (4.22)$$

és a kritikus pontban a rekurzió:

$$S_{N+1}(\lambda_c) = \frac{1 - Z^{2m}}{1 - Z^2} S_N(\lambda_c), \quad (4.23)$$

$$Z = r^{[\omega/(m-1)]N^{\omega-1}} \quad (4.24)$$

alakú. Nagy N esetén Z különbözőképpen skálázódik $\omega = 1$ -re, $\omega < 1$ -re és $\omega > 1$ -re, és a megfelelő $S_N(\lambda_c)$ szintén különböző a három esetben. A fentiekben már vizsgált $\omega = 1$ esetben $S_N(\lambda_c)$ a rendszermérettől hatványfüggvény szerint függ:

$$S_N(\lambda_c) \sim L^{2x_s}, \quad (4.25)$$

ahol a véges méret skálázás szerint x_s a felületi spinek skáladimenziója. Felhasználva $\delta(1, m)$ -et, a (4.23-4.25) egyenletekből látható, hogy x_s megegyezik β_s -sel, és így a $\beta_s = \nu x_s$ skálafeltétel kielégül, hiszen a korrelációs hossz kritikus exponense a kétdimenziós Ising-modell esetén $\nu = 1$.

Végesméret skálázással megvizsgálható a rendszer kritikus viselkedése a lánc jobb végén $L = m^N$ kötés esetén. (Ha a lánc $m^N - 1$ kötést tartalmaz, ahogy korábban, akkor szimmetrikus a középpontjára és a felületi mágnesezettség ugyanaz a két végen.) A jobb vég felületi mágnesezettségének inverz négyzetét $\bar{S}_N(\lambda, r)$ -rel jelölve egyszerű

összefüggést kapunk

$$\bar{S}_N(\lambda, r) = 1 + \lambda^{-2} r^{-2N} S_N(\lambda, r), \quad (4.26)$$

amelyből az $\bar{x}_s$ — a jobb vég felületi mágnesezettségének skáladimenziója —

$$\bar{x}_s = x_s - \frac{\ln r}{\ln m} = \frac{\ln \left[\frac{1-\lambda_c^{2m}}{1-\lambda_c^2} \right]}{2 \ln m}, \quad (4.27)$$

és így

$$\bar{x}_s(\lambda_c) = x_s(\lambda_c^{-1}). \quad (4.28)$$

Az $0 < \omega < 1$ esetben Z egyhez tart és (4.23) rekurzió vezető rendben

$$S_{N+1}(\lambda_c) = m(1 + \omega N^{\omega-1} \ln r) S_N(\lambda_c), \quad (4.29)$$

melynek megoldása $S_N(\lambda_c) \sim m^N r^{N^\omega}$. Véges méret skálázással, felhasználva, hogy $m^N \simeq L \sim |t|^{-\nu}$, illetve $\nu = 1$, a felületi mágnesezettség hőmérsékletfüggése

$$m_s(t) \sim t^{1/2} r^{-(|\log t|/\log m)^\omega/2}. \quad (4.30)$$

Így a felületi mágnesezettség ebben az esetben ugyanazzal a $\beta_s = 1/2$ exponenssel tűnik el, mint a homogén modellben, ahol $r = 1$, de logaritmikus korrekciók vannak. A csatolásokban levő hierarchikusan változó perturbáció az $0 < \omega < 1$ esetben tehát marginálisan irreleváns.

A rendszer viselkedése az $\omega > 1$ esetben teljesen különböző. Külön kell vizsgálni az $r > 1$ esetet, amikor Z divergál, és az $r < 1$ esetet, amikor Z zérushoz tart. Az első esetben az aszimptotikus rekurzió

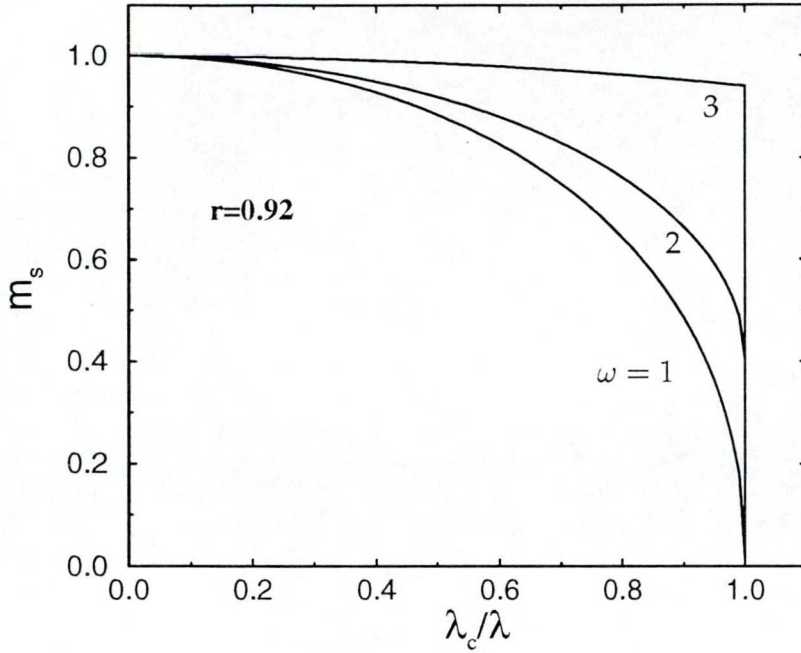
$$S_{N+1}(\lambda_c) = r^{2\omega N^{\omega-1}} S_N(\lambda_c) \quad (4.31)$$

alakú, aminek a megoldása

$$S_N(\lambda_c) \sim r^{2N^\omega}. \quad (4.32)$$

Így a felületi mágnesezettség csatolásfüggése anomális

$$m_s(t) \sim r^{-(|\log t|/\log m)^\omega}, \quad (4.33)$$



4.3 ábra: A kvantum Ising-lánc felületi mágnesezettségének hőmérsékletfüggése az $r = 0.92$ hierarchikus paraméter esetén, különböző egész ω -kra

gyorsabb lefutású mint bármely hatvány függvény, ahogy $\lambda \rightarrow \lambda_c$.

Az $r < 1$ esetben (és $\omega > 1$) Z tart zérushoz és az aszimptotikus reláció

$$S_{N+1}(\lambda_c) = \left(1 + r^{\frac{2\omega}{m-1}} N^{\omega-1}\right) S_N(\lambda_c), \quad (4.34)$$

amelyből leolvasható, hogy $\lim_{N \rightarrow \infty} S_N(\lambda_c) < \infty$, hiszen a zárójelben lévő második tag exponenciálisnál gyorsabban tart zéróhoz. Így a

$$\prod_{N=N_0}^{\infty} \left(1 + r^{\frac{2\omega}{m-1}} N^{\omega-1}\right) \quad (4.35)$$

szorzat konvergens. Következésképp a felületi mágnesezettség véges marad a kritikus pontban és a fázisátalakulás a felületen elsőrendű. A (4.34) szerint a felületi mágnesezettség anomális módon éri el az $m_s(0)$ határértékét:

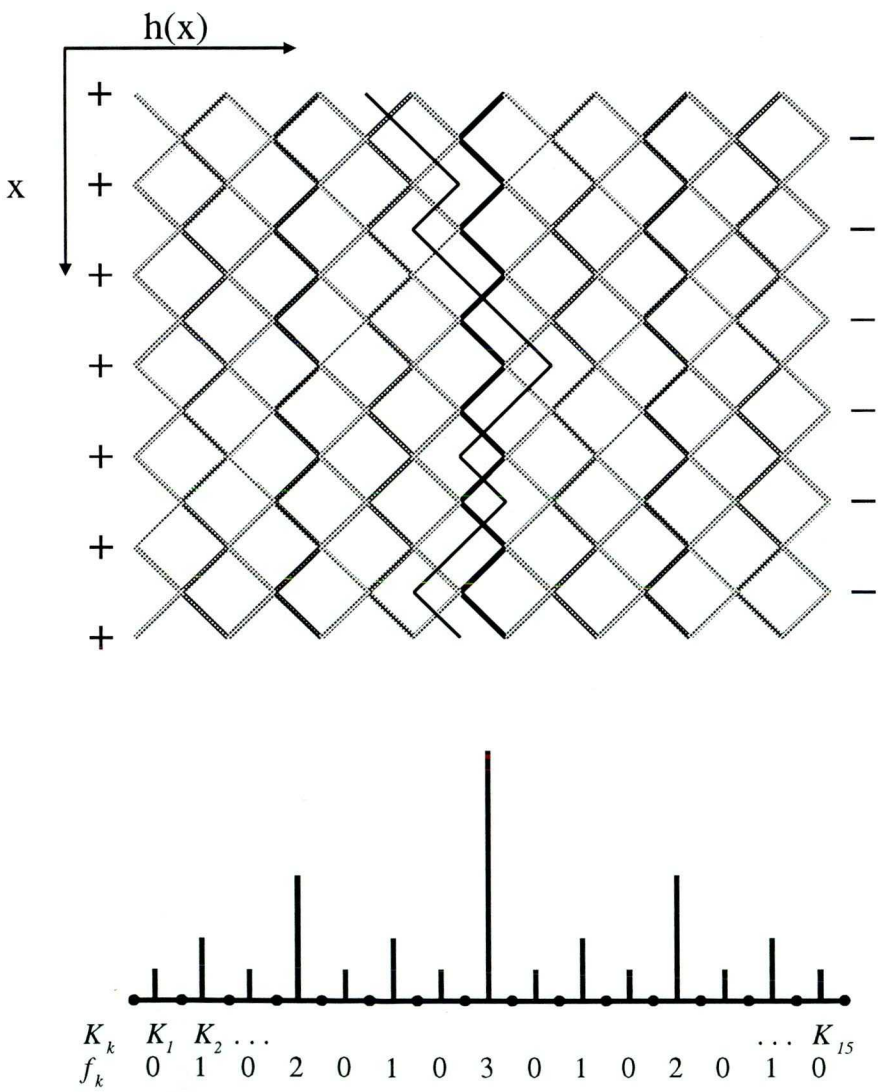
$$m_s(t) - m_s(0) \sim r^{|\log t / \log m|^{\omega-1} 2\omega / (m-1)}, \quad (4.36)$$

ahol felhasználtam, hogy $L \sim t^{-1}$.

A felületi mágnesezettség $r = 0.92$ hierarchikus paraméter és különböző $\omega \geq 1$ értékek esetén a 4.3 ábrán látható.

4.3 Határfelületi fluktuáció

A diagonális réteges ferromágneses négyzetrácsot vizsgálom ebben az alfejezetben. A négyzetrácsban Ising-spinek foglalnak helyet és a rétegek közötti kötés hierarchikusan változik (ld. 4.4 ábra).



4.4 ábra: A struktúra nélküli határfelület a diagonálisan réteges hierarchikus rácson. Az alsó ábrán az oszlopok magassága a spinek közötti csatolások erősségét jellemzi.

A csatolás a h -adik diagonálisban $K_h = J_h/k_B T$ az előző alfejezetben megismert hierarchikus sorozat szerint változik

$$K_h = \kappa_n, \quad h = 2^n(2m + 1), \quad (4.37)$$

ahol $\kappa_n = n\kappa_0$.

A jobb- és baloldali (11) felületeken a spinek ellentétes irányban rögzítettek és az így kialakuló pozitív és negatív tartományt elválasztó határfelület fluktuációját vizsgálom. A határfelület egy folytonos, struktúrával nem rendelkező lánc, amelyben a bonyolultabb konfigurációkat, mint például a „buborékokat” és a „kitüremkedéseket” kizárjuk. Általánosan elfogadott, hogy a határfelületi fluktuációk vizsgálatánál elegendő megtartani ezeket az ú.n. „solid-on-solid” (SOS) típusú határfelület konfigurációkat, amelyek irányított bolyongóval vagy polimerrel reprezentálhatók [77].

Az SOS modellben a határfelület egy x helyen a $h(x)$ magassággal jellemezhető és a határfelületi energia a következő $\mathcal{H}$ Hamilton-operátorral írható le:

$$\mathcal{H}/k_B T = \sum_x 2K_{h(x)}, \quad (4.38)$$

hiszen a spinek a határfelület mentén ellentétesen állnak. A „vég”-effektusokat figyelmen kívül hagyjuk, a lánc végei szabadok. A rendszer termodinamikai tulajdonságait transzfermátrix technikával vizsgálhatjuk legegyszerűbben. A transzfermátrix az x irányban a következő:

$$T_{h,l} = \delta_{h,l-1} e^{-2K_h} + \delta_{h,l+1} e^{-2K_l}. \quad (4.39)$$

Itt a transzfermátrix elemei egy $(\epsilon_0, \epsilon_1, \epsilon_2, \dots)$ halmazból választódnak ki — ahol $\epsilon_k = \epsilon_0 r^{f_k}$, $\epsilon_0 = e^{-2\kappa_0}$ a (4.37)-nek megfelelően — amelyben az egymás után következő elemek aránya konstans $\epsilon_{n+1}/\epsilon_n = r \leq 1$. A homogén rendszerre $r = 1$ és r általában az inhomogenitás mértékét jelenti. A határfelület kis valószínűséggel érint olyan helyeket, amelyeknél az ϵ_n mátrixelemre $n \gg 1$, mivel az ehhez tartozó valószínűség r^n faktorialisan súlyozott, hiszen ilyenkor a határfelület olyan spineket választana el egymástól, amelyek között a kötés $\kappa_n = n\kappa_0$ erős, ami valószínűtlenné teszi, hogy a spinek egymással ellentétesen álljanak be.

A határfelület σ szabadenergiáját és a $\xi_{||}$ longitudinális korrelációs hosszt, ami a rögzített határokkal párhuzamosan méri a korrelációt, a transzfermátrix Λ_L és Λ_{L-1}

két legnagyobb sajátértéke határozza meg³

$$\sigma = -\log \Lambda_L \quad (4.40)$$

$$\xi_{||}^{-1} = \log(\Lambda_L/\Lambda_{L-1}). \quad (4.41)$$

A határfelület fluktuációja hatványfüggvényszerűen nő

$$\langle [h(0) - h(x)]^2 \rangle \sim x^{2w}, \quad (4.42)$$

ahol w a vándorlási exponens, amelyről tudjuk, hogy $w = 1/2$ a homogén kétdimenziós rendszerben.

A probléma transzfermátrixa tridiagonális, szimmetrikus mátrix, így hatékony eszközökkel diagonalizálható, mint amilyen pl. a Lanczos módszer. Az adott problémában azonban — a hierarchikus struktúrának köszöhetően — egy rendkívül gyors algoritmust használhatunk a megfelelő determinánsok gyökeinek számolására.

Vegyük egy $L = 2^l$ méretű véges rendszert, és fejezzük ki a transzfermátrixának $D(2^l)$ determinánsát egy 2^{l-1} és egy $2^{l-1} - 1$ méretű aldeterminánssal

$$D(2^l) = D(2^{l-1})D(2^{l-1}) - D(2^{l-1} - 1)D(2^{l-1} - 1)\epsilon_{l-1}^2. \quad (4.43)$$

A $2^l - 2$ méretű $\tilde{D}(2^l - 2)$ szimmetrikus determináns, amelyet a $D(2^l)$ -ből kapunk elhagyva az első és utolsó sort illetve oszlopot, hasonlóképpen fejezhető ki:

$$\tilde{D}(2^l - 2) = D(2^{l-1} - 1)D(2^{l-1} - 1) - \tilde{D}(2^{l-1} - 2)\tilde{D}(2^{l-1} - 2)\epsilon_{l-1}^2. \quad (4.44)$$

Illetve

$$D(2^l - 1) = D(2^{l-1})D(2^{l-1} - 1) - D(2^{l-1} - 1)\tilde{D}(2^{l-1} - 2)\epsilon_{l-1}^2. \quad (4.45)$$

Ezek a képletek, kiegészítve a kezdődeterminánsokkal

$$D(1) = -\lambda, \quad D(2) = \lambda^2 - \epsilon_0^2 \quad \text{es} \quad \tilde{D}(2) = \lambda^2 - \epsilon_1^2 \quad (4.46)$$

definiálják a gyors eljárást a nagy méretű determinánsok értékének számolására. A gyengén perturbált rendszerre — $r \approx 1$ — $L = 2^{30} - 2^{40}$ méretek is kezelhetők voltak. A legnagyobb sajátértékek a legnagyobb rendszerek esetén 10–12 jegy pontosan

³ L szélességű rendszer esetén.



megkaphatók. A $\Lambda_i(L)$ sajátérték végesméretfüggését leíró y_Λ gap exponens

$$\Lambda_L - \Lambda_i(L) \sim L^{-y_\Lambda}, \quad (4.47)$$

amely a vándorlási exponenst is meghatározza, hiszen (4.41) és (4.47) egyenletekből látható, hogy $\xi_{||} \sim L^{y_\Lambda}$, és véges rendszerben az (11) felületre merőleges korrelációs hosszt a csík szélessége limitálja: $\xi_{\perp} \sim L$, így a határfelületi vándorlási exponens $\xi_{\perp} \sim \xi_{||}^w$ módon definiálható. A fentiek kombinálásából leolvasható, hogy

$$w = 1/y_\Lambda \quad (4.48)$$

r	Λ_L/ϵ_0	$w = 1/y_\Lambda$
1.0	2.0	0.5
0.999	1.99800894	0.4567199
0.9	1.82853274	0.4551092
0.75	1.62218648	0.4451438
0.5	1.35286081	0.4004540
0.25	1.14948652	0.3110577
0.1	1.05381456	0.2272971
0.001	1.00050038	0.0911867

4.1 táblázat: A legnagyobb sajátérték és a határfelületi fluktuációs exponens különböző hierarchikus paraméterek mellett.

A gap exponens viszonylag kisebb pontossággal volt megkapható: kb 5 jegy. A pontosság növelésére ebben az esetben olyan sorozatextrapolációs módszereket használtunk mint a Broeck-Schwartz illetve a Bulirsch-Stoer módszerek [24].

A transzfermátrix legnagyobb sajátértékei, amelyek meghatározzák a szabadenergiát és az extrapolált határfelületi vándorlási exponensek a 4.1 táblázatban láthatók. A legnagyobb sajátérték és a vándorlási exponens — láthatóan — monoton nő a hierarchikus paraméterrel. Az $r \rightarrow 0$ határesetben a határfelületi szabadenergia és a vándorlási exponens zérushoz tart, ami annak a ténynek felel meg, hogy a rendszer független részekre szeparálódik. A vándorlási exponens a legérdekesebb viselkedést a homogén eset környékén mutatja. Ahogy r az 1 érték alá csökken a vándorlási exponens a $w = \frac{1}{2}$ homogén értékről $\Delta w = 0.0432799$ mértékű véges ugrást szenved, ami azt mutatja, hogy ez az inhomogenitás releváns perturbációt jelent és egy másik stabil fixpontba viszi a rendszert — renormálási csoport képbén.

4.4 Renormálási csoport vizsgálat

A kvantum Ising-lánc és a határfelületi fluktuáció a renormálási csoport transzformáció segítségével egyszerre vizsgálható, hiszen — mint majd láthatjuk — a két rendszer ugyanazon mátrix elemei és sajátértékei renormálásának két különböző fixpontjához tartozik.

A korábbiak szerint a hierarchikus Ising-lánc

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{k=1}^L h \sigma_k^z - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{L-1} \lambda_k \sigma_k^x \sigma_{k+1}^x, \quad (4.49)$$

Hamilton-operátora — amelyben a λ_k -k a hierarchikus sorozat szerint változnak — egy Jordan-Wigner-transzformációval fermion operátorokkal kvadratikus alakba írhatók, majd egy Bogoljubov transzformációval a (2.36) diagonális alakra hozható, amelyben a Λ_q elemi fermion gerjesztések kielégítik a (2.37-2.38) mátrixegyenleteket, amelyek komponensekre kiírva a

$$\begin{aligned} \Lambda_q \Psi_q(k) &= -h \Phi_q(k) - \lambda_k \Phi_q(k+1), \\ \Lambda_q \Phi_q(k) &= -\lambda_{k-1} \Psi_q(k-1) - h \Psi_q(k), \end{aligned} \quad (4.50)$$

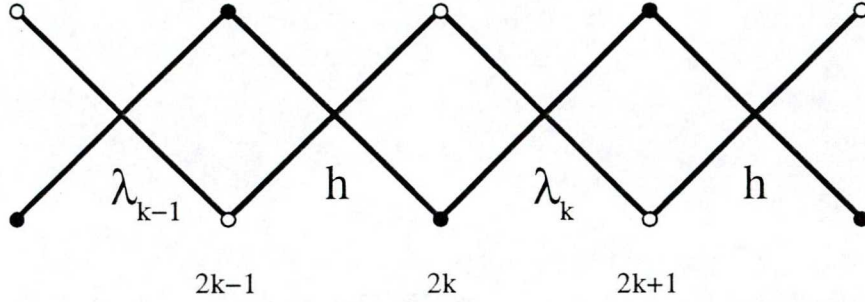
egyenleteket adják a $\lambda_0 = \lambda_L = 0$ szabad határfeltétellel. A Φ_q és Ψ_q vektorok elemei a Bogoljubov transzformáció együtthatóival állnak kapcsolatban és normáltak. Ezekből a vektorokból a $2L$ dimenziós V_q vektorokat a

$$V_q(2k-1) = -\Phi_q(k), \quad V_q(2k) = \Psi_q(k), \quad (4.51)$$

módon létrehozva láthatjuk, hogy a (4.50) egyenletek $\mathbf{aT}$

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} 0 & h & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ h & 0 & \lambda_1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \lambda_1 & 0 & h & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & h & 0 & \lambda_2 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & & \ddots & \end{pmatrix} \quad (4.52)$$

mátrix sajátértékproblémájának felelnek meg. A $\mathbf{T}$ mátrix úgy is tekinthető mint egy irányított bolyongó transzfermátrixa két egymásbacsúsztatott diagonálisan réteges négy-zetrácson (ld. 4.5 ábra).



4.5 ábra: A két egymásbacsúztatott diagonálisan réteges rács a bolyongó egy lépésének megfelelő szelete.

A bolyongó h és λ_k súlyokkal lép az elsőszomszéd rácspontok között a két négyzetrács egyikén és a bolyongás a diagonális irányában történik.

A (4.50) egyenletekből látható, hogy Φ_q -t $-\Phi_q$ -ra cserélve V_q -ban a megfelelő sajátérték előjelet vált. Így a T mátrix sajátértékproblémája a Λ_q spektrumot duplán tartalmazza: pozitív és negatív előjellel. Elegendő a spektrumnak csak a $\Lambda_q \geq 0$ részét vizsgálni, hiszen ez minden információt tartalmaz az irányított bolyongóról és az Ising-modellről.

Vizsgáljuk a rétegekkel párhuzamos *korrelációs hosszt* a két rendszer esetében. Az irányított bolyongó esetében (2.27) alapján a transzfermátrix két legnagyobb sajátértékével fejezhető ki a korrelációs hossz:

$$\xi_{\parallel}^{DW} = \left[\ln \left(\frac{\Lambda_L}{\Lambda_{L-1}} \right) \right]^{-1} \approx \frac{\Lambda_L}{\Lambda_L - \Lambda_{L-1}}, \quad (4.53)$$

amely láthatóan fordítottan arányos a transzfermátrix spektrumának tetején levő gap-pel. Az Ising-modell rendezetlen fázisában a korrelációs hossz a Hamilton-operátor legkisebb gerjesztési energiájának inverzével arányos (2.31):

$$\xi_{\parallel}^{IM} \sim \Lambda_1^{-1}. \quad (4.54)$$

A Λ_1 fermion gerjesztés a T transzfermátrix spektruma nemnegatív részének a legkisebb sajátértéke.

Ha valamelyik kritikus pont közelében vagyunk, akkor a megfelelő korrelációs

hossz divergál és a transzfermátrix spektrumának megfelelő része skálázási viselkedést mutat. Vegyünk egy $L \gg 1$ szélességű véges méretű rendszert és jelöljük $\Delta\Lambda_i$ -vel a $\Lambda_L - \Lambda_{L-i}$ -t az irányított polimer esetében, illetve Λ_i -t az Ising-modell esetében. A hosszúságskála $b > 1$ faktossal történő megváltoztatásakor — $L' = L/b$ — a gapek a következőképpen transzformálódnak:

$$(\Delta\Lambda_i)' = b^{y_\Lambda} \Delta\Lambda_i, \quad (4.55)$$

ahol az y_Λ skáladimenzió a spektrum különböző részeire általában más és más. Ez véges méret skálázási viselkedéshez vezet $\Delta\Lambda_i(L) \sim L^{-y_\Lambda}$, így a fent említett korrelációs hosszak $\xi_{||} \sim L^{y_\Lambda}$ szerint skálázódnak. Az Ising-modell esetén mivel $\xi_\perp \sim L$, a $\xi_{||} \sim \xi_\perp^z$ által definiált z anizotrópia exponens:

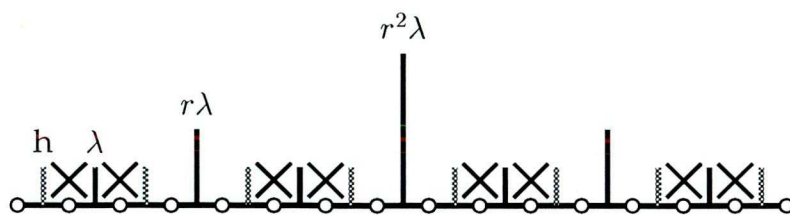
$$z = y_\Lambda. \quad (4.56)$$

Az irányított polimer esetében a w vándorlási exponensre (4.48):

$$w = y_\Lambda^{-1}.$$

Ezek az exponenseket a renormálási csoport transzformáció révén kaphatjuk meg.

Renormálási csoport transzformációs egyenletek. A renormálás során azokat a helyeket decimáljuk ki, amelyek λ csatolással vannak összekötve. Így $2(m-1)$ méretű blokkok tűnnek el, és helyettesítődnek egy kötéssel. (ld. 4.6 ábra)



4.6 ábra: A T mátrix hierarchikus sorozatnak megfelelő off-diagonális elemeit jelzik az oszlopok. A renormálandó mátrix sajátvektorának a megjelölt helyeknek megfelelő elemei kerülnek kidecimálásra a renormálási csoport transzformáció egy adott lépésében.

A $\hat{\lambda} = \lambda/h$ és $\hat{\Lambda} = \Lambda/h$ redukált változókat használva, majd elhagyva a „kalapokat”,

a

$$\begin{aligned}
\lambda r^n V(2m^n) - \Lambda V(2m^n + 1) + V(2m^n + 2) &= 0, \\
V(2m^n + 1) - \Lambda V(2m^n + 2) + \lambda V(2m^n + 3) &= 0, \\
\lambda V(2m^n + 2) - \Lambda V(2m^n + 3) + V(2m^n + 4) &= 0, \\
&\vdots \\
\lambda V(2m^n + 2m - 2) - \Lambda V(2m^n + 2m - 1) + V(2m^n + 2m) &= 0, \\
V(2m^n + 2m - 1) - \Lambda V(2m^n + 2m) + \lambda r V(2m^n + 2m + 1) &= 0.
\end{aligned}$$

sajátérték egyenletekhez jutunk. A $2m$ egyenletből a középső $2m - 2$ -t eliminálva a rendszer $b = m$ -ed részére skálázódik. A középső egyenletekbeli $V(2m^n + 2)$, $V(2m^n + 3)$, ..., $V(2m^n + 2m - 1)$ változók mind kifejezhetők $V(2m^n + 1)$ és $V(2m^n + 2m)$ -mel. Így kifejezve $V(2m^n + 2)$ -t és $V(2m^n + 2m - 1)$ -et, és ezeket visszaírva a két szélső egyenletbe, két összefüggésünk marad a $V(2m^n)$, $V(2m^n + 1)$, $V(2m^n + 2m)$ és $V(2m^n + 2m + 1)$ komponensek között:

$$\frac{\lambda r^n}{x} V(2m^n) - \frac{\Lambda - s}{x} V(2m^n + 1) + V(2m^n + 2m) = 0, \quad (4.57)$$

$$V(2m^n + 1) - \frac{\Lambda - s}{x} V(2m^n + 2m) + \frac{\lambda r}{x} V(2m^n + 2m + 1) = 0, \quad (4.58)$$

amelyekben $x = \lambda^{m-1}/D_{2m-2}$ és $s = -D_{2m-3}/D_{2m-2}$. A D_{2m-2} a következő $(2m - 2) \times (2m - 2)$ -es determinánst jelöli:

$$D_{2m-2} = \begin{vmatrix} -\Lambda & \lambda & & & \\ \lambda & -\Lambda & 1 & & \\ & 1 & -\Lambda & \lambda & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & 1 & -\Lambda & \lambda \\ & & & & \lambda & -\Lambda \end{vmatrix}, \quad (4.59)$$

illetve D_{2m-3} a jobb alsó minorja D_{2m-2} -nek. A (4.57-4.58) egyenletekből leolvasható a sajátértékek és a csatolási állandók transzformációja:

$$\Lambda' = \Lambda \frac{D_{2m-2}}{\lambda^{m-1}} + \frac{D_{2m-3}}{\lambda^{m-1}}, \quad \lambda' = \lambda r \frac{D_{2m-2}}{\lambda^{m-1}}. \quad (4.60)$$

A 4.60 egyenletekből az $m=2$ és $m=3$ esetben a transzformációs egyenletek:

$$\Lambda' = \frac{\Lambda}{\lambda^2} (\Lambda^2 - \lambda^2 - 1), \quad \lambda' = r (\Lambda^2 - \lambda^2) \quad (m=2), \quad (4.61)$$

$$\Lambda' = \frac{\Lambda}{\lambda} \left[(\Lambda^2 - \lambda^2)^2 - 2\Lambda^2 + \lambda^2 + 1 \right], \quad \lambda' = \frac{r}{\lambda} \left[(\Lambda^2 - \lambda^2)^2 - \Lambda^2 \right] \quad (m=3) \quad (4.62)$$

Fixpontok és kritikus exponensek. A (4.60) transzformációnak $\Lambda^* = 0$ -nál egy Ising-fixpontja van. A rendszer fixponthoz közeli tulajdonságainak vizsgálatához fejtsük ki a D_{2m-2} és D_{2m-3} determinánsokat Λ -ban lineáris rendig:

$$D_{2m-2} = (-\lambda^2)^{m-1} + \mathcal{O}(\Lambda^2), \quad D_{2m-3} = (-1)^{m-1} \Lambda \frac{1 - \lambda^{2m-2}}{1 - \lambda^2} + \mathcal{O}(\Lambda^3). \quad (4.63)$$

Ezeket visszaírva (4.60) egyenletekbe megkapjuk az *Ising-fixpont* helyét:

$$\Lambda^* = 0, \quad \lambda^* = (-1)^{m-1} r^{-1/(m-1)}. \quad (4.64)$$

A transzformációt linearizálva a fixpontnál a következő sajátértékeket kapjuk:

$$b^{y_\Lambda} = \left. \frac{\partial \Lambda'}{\partial \Lambda} \right|^* = \frac{|\lambda^*|^m - |\lambda^*|^{-m}}{|\lambda^*| - |\lambda^*|^{-1}}, \quad b^{y_t} = \left. \frac{\partial \lambda'}{\partial \lambda} \right|^* = m, \quad (4.65)$$

és $b=m$ -et figyelembevéve kapjuk az exponenseket:

$$z = y_\Lambda = \frac{\ln \left(|r^{m/(m-1)} - r^{-m/(m-1)}| \right) - \ln \left(|r^{1/(m-1)} - r^{-1/(m-1)}| \right)}{\ln m}, \quad y_t = \nu^{-1} = 1, \quad (4.66)$$

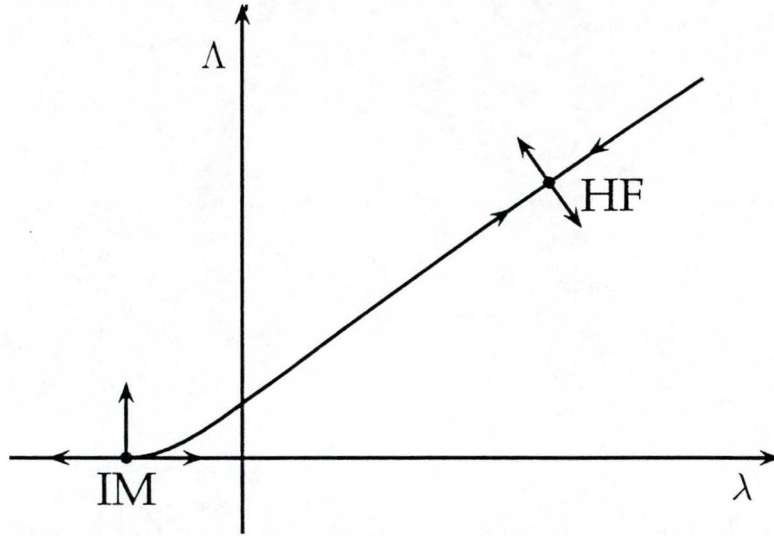
A transzformáció másik fixpontja a irányított bolyongó kritikus viselkedését határozza meg. A fixpont és a megfelelő kritikus exponensek csak $m=2$ és $m=3$ esetben adhatók meg zárt formában.

Az *irányított bolyongó fixpontja* az $m=2$ esetben a (4.61) egyenletekből kapható:

$$\Lambda^* = \frac{\sqrt{1-r+r^2}}{1-r}, \quad \lambda^* = \frac{r}{1-r}. \quad (4.67)$$

A linearizált transzformáció nagyobbik sajátértéke:

$$\epsilon_1 = \frac{1}{r} + r + \frac{1}{2} + \left[\left(\frac{1}{r} + r + \frac{1}{2} \right)^2 - 2 \right]^{1/2}, \quad (4.68)$$



4.7 ábra: Az Ising-modell és a határfelületi fluktuáció fixpontjai a renormálási csoport transzformáció fázissterében.

és így a bolyongó vándorlási exponense

$$w = \frac{1}{y_\Lambda} = \frac{\ln 2}{\ln \epsilon_1}, \quad (4.69)$$

hiszen itt $b = 2$ a skálafaktor. A renormálási csoport transzformáció másik sajátértéke $\epsilon_2 < 1$ és az ehhez tartozó skálatér irreleváns. (4.67)-ből látható, hogy a homogén esetben ($r = 1$) a transzformációnak nem létezik fixpontja, így a $w = \frac{1}{2}$ normális vándorlási exponenst nem kaphatjuk meg. Ezzel a módszerrel az anomális fluktuáció tartományában ($r < 1$) a renormálási egzakt eredményeket összehasonlítva a 4.1 táblázatban szereplő véges méret skálázással kapott numerikus eredményeinkkel, láthatjuk, hogy azok nagyon pontosak, (4.69)-cel legalább 6 jegyre megegyeznek.

Az irányított bolyongó az $m = 3$ esetben a (4.62) egyenletekből kaphatóan:

$$\Lambda^* = \frac{\sqrt{1+r^2}}{1-r}, \quad \lambda^* = \frac{\sqrt{2}r}{1-r} \quad (4.70)$$

fixponttal rendelkezik. A transzformáció legnagyobb sajátértéke:

$$\epsilon_1 = 2 \left(\frac{1}{r} + r + 1 \right) + \left[4 \left(\frac{1}{r} + r + 1 \right)^2 - 3 \right]^{1/2}, \quad (4.71)$$

és így a vándorlási exponens:

$$w = \frac{1}{y_\Lambda} = \frac{\ln 3}{\ln \epsilon_1}, \quad (4.72)$$

mivel $b=3$ a skálafaktor.

5. fejezet

Összefoglalás

A disszertációban különféle inhomogenitások hatását vizsgálom az Ising-modell fázisátalakulásaira. A véletlenszerű és bizonyos determinisztikusan meghatározott nemkorlátos perturbációk felületi és tömbi kritikus viselkedésre gyakorolt hatásai mind megfelelnek a korábban kidolgozott kvalitatív relevancia-irrelevancia kritériumoknak. Ezen rendszerek részletes vizsgálatát tartalmazza ez a dolgozat. A területen elért eredményeinket a következő pontokban foglalhatom össze röviden:

1. A kötéhígított kétdimenziós Ising-modell tömbi mágnesezettségét vizsgáltam a Wolff-féle klaszterflip Monte Carlo-módszerrel. Megállapítottam, hogy a mágnesezettség effektív exponense a hőmérséklet egy tartományában fölé nő a térelmélet által jósolt aszimptotikus értéknek, mely az irodalomban vitatott „overshooting”-nak nevezett jelenség a hígítás mértékével erősödik [86].
2. Meghatároztam a hígított Ising-modell felületi mágnesezettségének kritikus exponenseit különböző hígítások mellett, mind az (11) és az (10) felületeken. Megállapítottam, hogy mindkét esetben megegyezik a hígított modellek felületi kritikus exponense a tiszta rendszer azonos exponensével, azaz a hígítás (marginálisan) irreleváns jellegű. A felületi exponensek effektív értéke a hígítás növekedésekor csak kis mértékben változik meg, azaz robusztusabb mint a hasonló tömbi exponensek, ahol a korrekciós viselkedés erős, logaritmikus jellegű [86][35].
3. Diagonális rácson elkészítettem a mágnesezettségi profilokat és a hozzájuk tartozó effektív exponens profilokat és tanulmányoztam a tömbi és a felületi exponensek közötti „crossover” viselkedést. A felületi réteg vastagságának vizsgálatával meghatároztam a korrelációs hossz hígítás hatására történő megváltozását [86][35].
4. Vizsgáltam a kétdimenziós hierarchikus kötésosztású Ising-modell és az ennek — az extrém anizotóp határesetben — megfelelő egydimenziós kvantum Ising-lánc felületi kritikus viselkedését. Analitikus összefüggést találtam a felületi mágnesezettsé-

ség exponensének a hierarchikus paramétertől való függésére különböző hierarchikus szerkezetek esetén. Megállapítottam, hogy az általánosított hierarchikus sorozat a kötések fluktuációjának gyengítésekor marginálisan irreleváns perturbációt jelent, azaz csak logaritmikus korrekciók lépnek fel. Ugyanakkor a fluktuációk erősítésekor a perturbáció marginálisan releváns: a hierarchikus paramétertől függően a felületi fázisátalakulás vagy elsőrendű vagy a mágnesezettség minden hatványfüggvényénél gyorsabban cseng le [36].

5 A kétdimenziós hierarchikusan réteges Ising-modell két távoli párhuzamos felületen levő spinjeit ellentétes állapotban rögzítve vizsgáltam a fázisokat elválasztó határfelület fluktuációs tulajdonságait. Megállapítottam, hogy a határfelületi fluktuációk anomálisan viselkednek, a vándorlási (fluktuációs) exponens a hierarchikus paraméter folytonosan változó függvénye, melyet transzfermátrix módszerrel numerikusan meghatároztam [39].

6. A hierarchikus csatolású rendszerre alkalmaztam az aperiodikus rendszerekre korábban kidolgozott egzakt renormálási csoport transzformációt, amely a kétdimenziós Ising-rács határfelületi fluktuációját és a kvantum Ising-lánc kritikus problémáját azonos keretek között, egyazon renormálási csoport keretében tárgyalja. A megkonstruált renormálási csoport transzformáció két nem-triviális fixpontja a határfelületi fluktuációknak illetve az Ising-modellnek felel meg. A fixponti transzformáció analíziséből a két modell kritikus tulajdonságait egzaktul meghatároztam [39][42].

Függelék

Az $\delta(\omega, m)$ kiszámolásában kulcsfontosságú az n_j paraméter ismerete különböző $i = m, m^2, \dots, m^N, \dots$ hosszúságú szekvenciákra:

$$\begin{aligned} n_m &= 1, \\ n_{m^2} &= m n_m + 2^\omega - 1^\omega, \\ &\vdots \\ n_{m^N} &= m n_{m^{N-1}} + N^\omega - (N-1)^\omega, \end{aligned}$$

és általánosan

$$n_{m^N} = m^N \left(1 - \frac{1}{m}\right) \sum_{j=1}^{N-1} \frac{j^\omega}{m^j} + N^\omega$$

alakban írható. Ebből a kifejezésből a (4.10)-beli $\delta(\omega, m)$ az $N \rightarrow \infty$ határátmenettel már megkapható. A $\delta(\omega, m)$ pozitív egész ω -kra viszonylag egyszerű alakban felírható:

$$\delta(\omega, m) = \left\{ (1-x) \left(x \frac{d}{dx} \right)^\omega \left[\frac{1}{1-x} \right] \right\} \Big|_{x=\frac{1}{m}}.$$

n_{m^N} végesméret korrekciói

$$n_{m^N} - \delta(\omega, m) m^N = - \left(1 - \frac{1}{m}\right) \sum_{j=N}^{\infty} \frac{j^\omega}{m^j} + N^\omega = N^\omega \left(1 - \left(1 - \frac{1}{m}\right) \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(1+j/N)^\omega}{m^j}\right),$$

ahonnan — sorbafejtve $(1+j/N)^\omega$ -t kapjuk, hogy

$$n_{m^N} = \delta(\omega, m) m^N - \frac{\omega}{m-1} N^{\omega-1} + \mathcal{O}(N^{\omega-2}).$$



Angol nyelvű összefoglaló

This thesis investigates the effect of inhomogeneities on critical behavior by means of modern statistical physics.

Previous results

Critical behavior (second order phase transition) was already observed in the last century when condensation of CO_2 and other kinds of gases and their phase diagram were investigated. The phenomenon as the liquid and gaseous phases was well described by the van der Waals equation. Similar phase transition can be observed when heating up ferromagnetic materials, when it loses its spontaneous magnetization and becomes paramagnetic. The paramagnetic-ferromagnetic phase transition was described by Weiss' molecular field theory, which was able to support theoretically the empiric Curie's law of magnetic susceptibility.

Around the critical point both theory assumed implicitly that the free energy of the system can be expanded in the so called order parameter. This is the basic idea of the Landau theory, which describes the above two phenomena in the same framework introducing the notion of the order parameter and gives the possibility of investigating further systems such as superconductivity through the Ginzburg-Landau equation. The experimental results, the various results of high and low temperature series and Onsager's solution of the two dimensional Ising model pointed out the limits of the theory. As we presently know this approach actually gives correct information only a little away from the critical point. Very near the critical point it gives only a qualitative picture about the character of the phase transition as it could not allow for the long-range fluctuations because of the divergency of the correlation length.

The breakthrough in the area of the second order phase transitions was the adoption of the previously known renormalization in field theories, which through the renormalization group transformation maps the original system onto a system with less degrees of freedom, but with the same features such as the same symmetry in the

Hamiltonian. The parameters in the Hamiltonian shows scaling properties along the maps with the appropriate scaling dimensions, from which the critical exponents of various physical properties can be determined. The renormalization group transformation gave also the explanation why there are universality classes, i.e. why completely different physical systems have the same critical indices with different order parameters as well. Furthermore it gave an explanation for the relations between the critical exponents, the scaling laws and the observed phenomenon that the concrete values of the microscopic parameters does not affect the universality classes.

The Ising model examined in the thesis also by virtue of its simplicity is one of the most fundamental model that describes cooperative phenomena as there is a two-valued spin variable associated with each site of a lattice. While previously the intermolecular interactions between the spins appeared to be rather oversimplified and in this way the model was thought of as an inappropriate model for describing a real system, nowadays learning the renormalization group transformation it is clear that the microscopic details in the short-range interactions apparently do not affect the cooperative properties especially the critical behavior. Along the years the Ising model became one of the most studied model of statistical physics which by virtue of universality it describes the liquid-gas phase transition, the previously mentioned magnetic phase transition, the order-disorder transition in binary alloys or the phase separation in liquid mixtures.

Investigation of systems with disorder or containing certain inhomogeneities (surfaces, linedefects, etc.) also started based on the results of the investigation of the critical behavior of homogeneous systems. The first of these investigations were the periodically and the randomly layered two-dimensional Ising model (McCoy-Wu model) and the investigation of the critical behavior of the directed walk in inhomogeneous or random media.

To study the effects of inhomogeneities has fundamental importance as we cannot find perfectly pure system or perfectly periodic crystal lattice without dislocations and point defects in nature.

One of the main topics of the thesis is the examination of the critical behavior of the inhomogeneous (bond-diluted) Ising model. According to the criterion worked out by Harris the relevance-irrelevance of perturbation caused by inhomogeneities depends on specific heat exponent of the homogeneous system. This is zero in the case of the two-dimensional Ising model and in this way this is the marginal case of the criterion. In this case the critical behavior of the of the diluted system can only be determined by detailed study.

Quasicrystals discovered in 1984 can be considered as an intermediate between pure (periodic) and disordered (diluted) systems. These are deterministic but non-periodic structures whose Fourier spectrum can be described as a superposition of discrete, finite, irrationally relating peaks, so it does not have a point symmetry corresponding to a periodic structure. Along the discovery of quasicrystals the production of multilayers with aperiodic structures that can be produced artificially gave a new impulse to the examination of inhomogeneous systems. By virtue of molecular beam epitaxy quasiperiodic or more generally aperiodic structures were produced, whose theoretical investigation is also very interesting, like for example the Fibonacci superlattice structure consisting of *GaAs* – *AlAs* alternating layers. The special properties of the new structure were confirmed by X-ray and Raman scattering examinations.

The hierarchical system I examine in the dissertation is a similar special structure, in which the coupling constants between the spins shows such a self-similar order. Recently such structures were observed in several artificial or natural systems such as, relaxation processes of disordered systems (spinglasses) or proteins. Some more distant examples are computer architectures, geological processes before large earthquakes and in the everyday life various economic organizations or stock market exchange rates show similar tendency. Various numerical and exact results showed that diffusion can be anomalous in a hierarchical “potential”, which is called ultradiffusion.

A relevance-irrelevance criterion similar to the Harris criterion for random magnets was found by Luck for phase transitions of general aperiodic structures. In this case the sign of the crossover exponent consisting of the correlation length exponent of the non-perturbed system and the wandering exponent of the aperiodic sequence decides the type of the phase transition of the inhomogeneous system. The perturbation is marginal if the crossover exponent is zero. Critical exponents continuously varying with the value of the coupling and anisotropic scaling were observed in several such systems, in which exact results are also known. In case of anisotropic scaling correlation lengths measured parallel to the layers and perpendicular to them diverge with different exponents in the critical point. The hierarchically layered Ising model also belongs to this special type of systems as our investigations showed it.

Methods of investigation

TRANSFER MATRIX METHOD

With the aid of the method, which was first used by Kramers and Wannier in 1941

for investigating the Ising model the partition function of a system can be figured out as a trace of powers of matrices. The transfer matrix connects the states of consecutive layers in the direction of translational symmetry. To calculate the free energy and the correlation length of a system the two largest eigenvalues of the transfer matrix is needed (in the thermodynamic limit). In case of the two-dimensional N -layered Ising model an eigenvalue problem of a $2^N \times 2^N$ matrix must be solved, which is equivalent in the extreme anisotropic case with the eigenvalue problem of the Hamilton operator of the one-dimensional quantum Ising chain. To solve the Hamiltonian we transform the spin operators to fermionic operators with a Jordan-Wigner transformation and than after a Bogoliubov transformation on the latters we get a free fermionic system. In the latter step of the calculation the solution of an eigenvalue problem of an $N \times N$ matrix is needed. The first excitations of the quantum problem are in a one-one relationship with the correlation length of the two-dimensional problem, so examining that makes possible the investigation of the phase transition of the two-dimensional system.

The problem of interface fluctuation can also be investigated by the transfer matrix method. In this case the problem is less difficult comparing to the Ising model since the dimension of the transfer matrix is N . It can be shown that this transfer matrix is equivalent with the matrix in the Ising model got after the Bogoliubov transformation.

RENORMALIZATION GROUP TRANSFORMATION

The transformation with which one can confirm the scaling and the universality hypothesis is an important (numerical) calculational method as well. Through changing the length scale the renormalization is generally performed on the Hamiltonian in the partition function. The hierarchical system discussed in the thesis naturally provide the opportunity of performing the renormalization through its self-similarity. In our case we perform the transformation not on the Hamiltonians, but on the elements and eigenvalues of the matrices occurring in the problems. The equivalence of the matrices in the problem of the spin system and the interface fluctuation makes it possible to discuss them in the same framework. The two problems belong to two different non-trivial fixpoints of the transformation. The fixpoint describing the lower edge of the spectrum controls the critical behavior of the Ising model, while the other one describing the higher edge of the spectrum controls the critical behavior of the interface fluctuation.

MONTE CARLO METHODS

In the dissertation I applied various classical (Metropolis algorithm) and modern (Swendsen-Wang and Wolff algorithms) computational methods. Among these I app-

lied the Metropolis algorithm mainly for domains away from the critical point since this method as generally the one-spinflip methods cannot be applied at temperatures nearby the critical state because of the phenomenon of critical slowing-down. A great result of the end of the '80-ies is the work-out of such clusterflip algorithms, in which the critical slowing down practically disappears, so the greater and greater system sizes because of the divergency of the correlation length do only cause problems in the numerical calculations. The Swendsen-Wang and Wolff's clusterflip algorithms moreover needs even less CPU time in various diluted systems than in the homogeneous case since they are the fastest in the percolation limiting case.

Results

My results can be summarized in the following six points:

1. I investigated the bulk magnetization of the bond diluted two-dimensional Ising model with Wolff's clusterflip Monte Carlo method. I verified that the effective exponent of the magnetization goes higher in some range of temperature than the field theoretically predicted asymptotic value, which phenomena called "overshooting" disputed in the literature gets stronger with dilution [86].

2. I determined the surface magnetic critical exponents of the diluted Ising model for different dilutions, both for the (11) and the (10) surfaces. I found out that in both cases the surface critical exponents of the diluted models coincide the counterpart exponent of the pure system, i.e. the dilution is (marginally) irrelevant. The effective value of the surface exponents changes only slightly for stronger dilutions, i.e. it is more robust than the similar bulk exponents in which there are strong logarithmic corrections [86][35].

3. I made the magnetization profiles and the corresponding effective exponent profiles for the diagonal lattice and studied the crossover behavior between the bulk and the surface. Examining the thickness of the surface layer I determined the change in the correlation length with dilution [86][35].

4. I studied the surface critical behavior of the two-dimensional hierarchically layered Ising model and in the extreme anisotropic limit that of the corresponding one-dimensional quantum Ising chain. I found analytic relation between the surface magnetization critical exponent and the hierarchical parameter in different hierarchical structures. I found out that in the case of the generalized hierarchical series weakening the fluctuation in the couplings causes marginally irrelevant perturbation, i.e. only loga-

rithmic corrections occur. At the same time, strengthening the fluctuations the perturbation becomes marginally relevant, i.e. the surface phase transition is first order or the magnetization decays faster than any power law depending on the hierarchical parameter [36].

5. Fixing the spins oppositely in the two distant surfaces of the two-dimensional hierarchically layered Ising model I investigated the fluctuation properties of the interface separating the two phases. I found out that the interface fluctuations behave anomalously, the wandering (fluctuation) exponents are a continuously changing function of the hierarchical parameter, which I determined numerically applying transfer matrix method [39].

6. I applied for hierarchically coupled systems the previously elaborated exact renormalization group transformation for aperiodic systems, which discusses the problem of the interface fluctuation of the two-dimensional Ising lattice and the quantum Ising chain in the same framework of renormalization group. The two non-trivial fixed points of the renormalization group transformation built up correspond to the interface fluctuation and the Ising model. From the analysis of the transformation at the fixed point I calculated analytically the critical behavior of the two models [39][42].

Köszönetnyilvánítás

Legelső helyen szeretném megemlíteni témavezetőmet, Dr. Iglói Ferencet, a fizikai tudományok doktorát, akinek a modern statisztikus fizikai módszerek terén szerzett tudásomat köszönhetem. Köszönöm, hogy mindamellet, hogy a kutatómunka során mindenben támogatott, az önálló gondolkodásra és tevékenységre is lehetőséget biztosított, és mindig hatékony munkára sarkallt.

Köszönetet szeretnék mondani tanszékvezetőmnek, Dr. Gyémánt Ivánnak is, aki végig figyelemmel kísérte működésemet és megértően viszonyult hozzá, továbbá a tanszék többi tagjának is hasonlóan kedvező hozzáállásukért, különösképpen Lajkó Péternek, aki egy évvel több tapasztalattal rendelkezvén a PhD-s tevékenység területén szükség esetén tanácsokkal látott el.

Hálás vagyok még Prof. Walter Selkének, akinek segítségével a Monte Carlo-módszer terén szerzett tudásomat mélyíthettem el, valamint az Aacheni Műszaki Egyetemnek, hogy magas színvonalú eszközök és megfelelő körülmények biztosításával segítették a minél eredményesebb munkát.

Sokat jelentett számomra a Soros Alapítvány támogatása, mely többször lehetőséget teremtett arra, hogy ismereteimet külföldön is bővíthessem. Köszönöm a disszertáció megírásához nyújtott anyagi segítségét.

Végül, de nem utolsó sorban köszönettel tartozom szüleimnek, akik érdeklődéssel követték munkámat és feleségemnek, aki mindig mellettem állt és bátorított.

Irodalomjegyzék

- [1] Aarao Reis F. D. A., de Queiroz S. L. A. és dos Santos R. R., *Phys. Rev.* **B56**, 6013 (1997)
- [2] Andreichenko V. B., Dotsenko Vl. S., Selke W., Wang J. S. *Nucl. Phys.* **B344**, 531 (1990)
- [3] Austin R. H., Berson K. W., Eisenstein L., Frauenfelder L. H. és Gunsalus I. C., *Biochem* **14**, 5355 (1975)
- [4] Bariev R. Z. *Teo. Mat. Fiz.* **40**, 95 (1979)
- [5] Barkema G. T. és Newman M. E. J., *Monte Carlo Methods in Chemical Physics*, szerk.: Ferguson D., Siepmann J. I. és Truhlar D. G., Wiley, New York (1997)
- [6] Berche B., Berche P. E., Henkel M., Iglói F., Lajkó P., Morgan S. és Turban L., *J. Phys. A* **28** L165 (1995)
- [7] Berche P. E. Berche B. Turban L., *J. Phys. I France* **6**, 621 (1996)
- [8] Binder K. *Phase Transitions and Critical Phenomena* vol. **8** ed. C. Domb és J. L. Lebowitz (Academic Press London) (1983)
- [9] Bogoljubov N. N., *Nuov. Cimen.* **7**, 794 (1958)
- [10] Cardy J., *Phase Transitions and Critical Phenomena* vol. **11** ed. C. Domb és J. L. Lebowitz (Academic Press London) (1987)
- [11] Cardy J., *J. Phys.* **A29**, 1897 (1996)
- [12] Compagner A. *Am. J. Phys.* **59**, 700 (1991), *J. Stat. Phys* **63**, 883 (1991)
- [13] Doria M. M., Satija I. I., *Phys. Rev. Lett.* **60**, 444 (1988)
- [14] Dotsenko Vik. S., Dotsenko Vl. S., *Sov. Phys. JETP Lett.* **33**, 37 (1981), *Adv. Phys.* **32**, 129 (1983)

- [15] Feigenbaum J. A., Freund P. G. A., *cond-mat/9509033*
- [16] Fischer M. E., *Physics* **3**, 255 (1967)
- [17] Fischer M. E., *J. Phys. Soc. Jpn. Suppl.* **26**, 87 (1968)
- [18] Fortuin C. M. és Kasteleyn P. W., *Physica* **57**, 536 (1972)
- [19] Garg A., Levine D., *Phys. Rev. Lett.* **59**, 1683 (1987)
- [20] Giacometti A., Maritan A. és Stella A. L., *Int. J. Mod. Phys.* **B5**, 709 (1991)
- [21] Guggenheim E. A., *J. Chem. Phys.*, **13**, 253 (1945)
- [22] Harris A. B., *J. Phys.* **C7**, 1671 (1971)
- [23] Heisenberg W., *Z. Phys.* **49**, 619 (1928)
- [24] Henkel M. és Schütz G., *J. Phys.* **A20**, 2617 (1988)
- [25] Henley C. L., Lipowsky R., *Phys. Rev. Lett.* **59**, 1679 (1987)
- [26] Hilhorst H.J., Schick M. és van Leeuwen J. M. J., *Phys. Rev.* **B19**, 2749 (1979)
- [27] Hilhorst H. J. és van Leeuwen J. M. J., *Phys. Rev. Lett.* **47** 1188 (1981)
- [28] Hiramoto H. és Kohmoto M., *Int. J. Mod. Phys.* **B6**, 281 (1992)
- [29] Hornreich R. M., Luban M., Shtrikman S., *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1678 (1975)
- [30] Huang Y., Saleur H., Sammis C. G., Sornette D., *cond-mat/9612065*
- [31] Huberman B. A. és Hogg T., *Phys. Rev. Lett.* **52**, 1048 (1984)
- [32] Huberman B. A. és Kerszberg M., *J. Phys A* **18**, L331 (1985)
- [33] Iglói F., *J. Phys. A* **26**, L703 (1993)
- [34] Iglói F. és Lajkó P., *J. Phys A* **29**, 4803 (1996)
- [35] IGLÓI F., LAJKÓ P., SELKE W., SZALMA F., *J. Phys. A* **31**, 2801-2813 (1998)
- [36] IGLÓI F., LAJKÓ P., SZALMA F., *Phys. Rev. B* **52**, 7159-7165 (1995)
- [37] Iglói F., Peschel I., Turban L., *Adv. Phys.* **42**, 683 (1993)

- [38] Iglói F., Rieger H., *Phys. Rev.* **B56**, 11031 (1997)
- [39] IGLÓI F., SZALMA F., *Phys. Rev. E* **54**, 1106-1110 (1996)
- [40] Iglói F. és Turban L., *Europhys. Lett.* **27**, 91 (1994)
- [41] Iglói F. és Turban L., *Phys. Rev. Lett.* **77** 1206 (1996)
- [42] IGLÓI F., TURBAN L., KAREVSKI D., SZALMA F., *Phys. Rev. B* **56**, 11031-11050 (1997)
- [43] Ising E., *Z. Phys.* **31**, 253-8 (1925)
- [44] Janssen T. és Los J., *Phase Transitions* **32**, 29 (1991)
- [45] Jordan P. és Wigner E., *Z. Phys.* **47**, 631 (1928)
- [46] Kadanoff L. P., *Physics* **2**, 263 (1966)
- [47] Kadanoff L. P. et al., *Rev. Mod. Phys.* **39**, 395 (1967)
- [48] Kim J. K. és Patrascioiu A., *Phys. Rev. Lett.* **72**, 2785 (1994)
- [49] Kühn R., *Phys. Rev. Lett.* **73**, 2268 (1994)
- [50] Kirkpatrick S. és Stoll E. P., *J. Comput. Phys.* **40**, 517 (1981)
- [51] Knuth D., *The Art of Computer Programming*, Vol. 2, Addison-Wesley, Reading MA (1969)
- [52] Kogut J. B., *Rev. Mod. Phys.* **51**, 659 (1979)
- [53] Kramers H. A. és Wannier G. H., *Phys. Rev.* **60**, 252 (1941)
- [54] Lajkó P., PhD értekezés (1998)
- [55] Landau L. D., *Phys. Zs. USSR*, **11**, 26 (1937)
- [56] Landau L. D., Lifsic E. M., *Statisztikus fizika 1.*, Elméleti fizika V. köt., Tankönyvkiadó (1981)
- [57] Lehmer D. H., *Proc. 2nd Symposium on Large-Scale Digital Computing Machinery* (Harvard University, Cambridge 1951) p. 142
- [58] Levin D., Steinhardt P. J., *Phys. Rev. Lett.* **53**, 2477 (1984)

- [59] Lieb E. H., Schultz T. D. és Mattis D. C. *Ann. Phys. NY* **16**, 406 (1961)
- [60] Lin Z. és Goda M. *Phys. Rev.* **B51**, 6093 (1995)
- [61] Lipowsky R., Fischer M. E., *Phys. Rev. Lett.* **56**, 472 (1986)
- [62] Luck J. M., *J. Stat. Phys.* **72**, 417 (1993)
- [63] Luck J. M., *Europhys. Lett* **24**, 359 (1993)
- [64] Ludwig A. W. W. *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2388 (1988), *Nucl. Phys.* **B330**, 639 (1990)
- [65] Maritan A., Stella A. L., *J. Phys. A* **19**, L269 (1986)
- [66] McCoy B. M. és Wu T. T., *Phys. Rev.* **176**, 631, (1968)
- [67] Merlin R., Bajema K., Clarke R., Juang F.-Y., és Bhattacharya P. K., *Phys. Rev. Lett.* **55**, 1768 (1985)
- [68] Metropolis N., Rosenbluth A. W., Rosenbluth M. N., Teller A. H., Teller E. *J. Chem. Phys.* **21**, 1087 (1953)
- [69] Mézard M., Parisi G., Sourlas N., Toulouse G. és Virasoro M., *Phys. Rev. Lett.* **52**, 1156 (1984)
- [70] Onsager L. *Phys. Rev.* **65**, 117 (1944)
- [71] Peschel I. *Phys. Rev.* **B30**, 6783 (1984)
- [72] Peschel I. *Phys. Lett.* **110A**, 313 (1985)
- [73] Pfeuty P., *Annals of Physics* **57**, 79 (1970)
- [74] Pfeuty P., *Phys. Lett.* **72A**, 245 (1979)
- [75] Pleimling M., Selke W. *Eur. Phys. J.* **B1**, 385 (1998)
- [76] Potts R. B., *Proc. Camb. Phil. Soc.* **48**, 106 (1952)
- [77] Privman V. és Svratkic N. M., *Directed Models of Polymers, Interfaces and Clusters: Scaling and Finite-Size Properties*, Lecture Notes in Physics vol. 338 (Springer, Berlin, 1989)
- [78] de Queiroz S. L. A. és Stinchcombe R. B., *Phys. Rev.* **E54**, 190 (1996)

- [79] Schechtman D., Blech I., Gratias D. és Cahn J. W., *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1951 (1984)
- [80] Schultz T. D., Mattis D. C. és Lieb E. H. *Rev. Mod. Phys.* **36**, 856 (1964)
- [81] Shalaev B. N. *Sov. Phys. Solid State* **26**, 1811 (1984), *Physics Reports* **237**, 129 (1994)
- [82] Shankar R. *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2466 (1987), **61**, 2390 (1988)
- [83] Shchur L. N. és Blöte H. W. J., *Phys. Rev. E* **55** 4905 (1997)
- [84] Selke W., *magán beszélgetés* (1997)
- [85] Selke W., Schur L. N., Talapov A. L., Monte Carlo Simulations of Dilute Ising Models, in *Annual Reviews of Computational Physics*, ed. Stauffer D., World Scientific, Singapore (1994)
- [86] SELKE W., SZALMA F., LAJKÓ P., IGLÓI F., *J. Stat. Phys.* **89**, 1079-1085 (1997)
- [87] Simon H. A., Ando A., *Econometrica* **29**, 111 (1961)
- [88] Stauffer D., Aarao Reis F. D. A., de Queiroz S. L. A. és dos Santos R. R., *Int. J. Mod. Phys.* (1997) megjelenés alatt
- [89] Stella A. L., Swift M. R., Amar J. G., Einstein T. L., Cole M. W., Banavar J. R., *Phys. Rev. Lett.* **71**, 3818 (1993)
- [90] Stinchcombe R. B., in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, vol. 7., eds. C. Domb és J. L. Lebowitz, Academic Press, New York (1983)
- [91] Swendsen R. H., Wang J. S. *Phys. Rev. Lett.* **58**, 86 (1987)
- [92] Talapov A. L., Schur L. N., Critical point correlation function for the 2D random bond Ising model, Preprint 9404001@hep-lat.
- [93] Talapov A. L., Schur L. N., Critical region of the random bond Ising model, Preprint 9404011@hep-lat.
- [94] Teitel S., Kutasov D. és Domany E., *Phys. Rev. B* **36**, 684 (1987)
- [95] Turban L., Iglói F. és Berche B., *Phys. Rev.* **B49**, 12695 (1994)
- [96] van der Waals J. D., Doktori disszertáció, (1873)
- [97] Wang J. S., Selke W., Dotsenko V. I., Andreichenko V. B. *Europhys. Lett.* **11**, 301 (1990), *Physica A* **164**, 221 (1990)

- [98] Wang J. S. és Swendsen R. H., *Physica A* **167**, 565 (1990)
- [99] Wannier G. H., *Rev. Mod. Phys.* **17**, 50 (1945)
- [100] Weiss P., *J. de Phys.* **6**, 660 (1907)
- [101] Widom B., *J.Chem. Phys.* **43**, 3892 (1965)
- [102] Widom B., *J.Chem. Phys.* **43**, 3898 (1965)
- [103] Wilson K. G., *Phys. Rev.* **B4**, 3074 (1971)
- [104] Wolff U., *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1461 (1988)
- [105] Wolff U., *Phys. Rev. Lett.* **62** 361 (1989)
- [106] Yang C. N., *Phys. Rev.* **85**, 808 (1952)
- [107] Ziegler K., *Nucl. Phys.* **B344**, 499 (1990), *Europhys. Lett.* **14**, 415 (1991)
- [108] Zobin D., *Phys. Rev.* **B18**, 2387 (1978)